ENTWICKLUNG EINES MULTIVARIABLEN, GRAPHISCHEN DISPLAYS ZUR ÜBERWACHUNG EINES CHEMISCHEN REAKTORS

Dissertation
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften
der Fakultät für Chemie und Pharmazie
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
Wilfried A. Musterle
aus Tübingen

1987

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41543904_0078

ENTWICKLUNG EINES MULTIVARIABLEN, GRAPHISCHEN DISPLAYS ZUR ÜBERWACHUNG EINES CHEMISCHEN REAKTORS

Dissertation
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften
der Fakultät für Chemie und Pharmazie
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
Wilfried A. Musterle
aus Tübingen

1987

Tag der mündlichen Prüfung:	1. Dezember 1986
Dekan:	Prof. Dr. D. Mecke
1. Berichterstatter:	Prof. Dr. O. E. Rössler
2. Berichterstatter:	Prof. Dr. F. F. Seelig

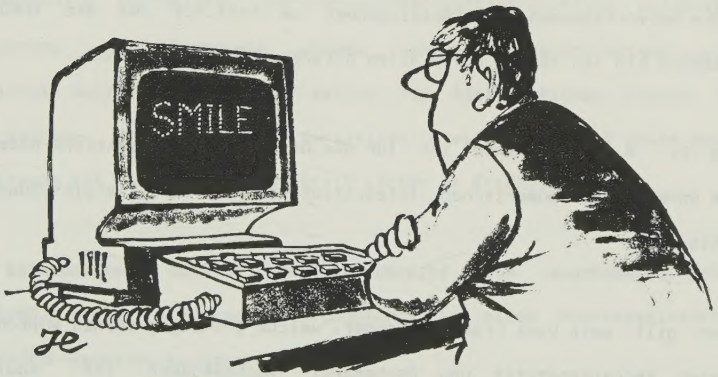


bild der wissenschaft

Diese Arbeit entstand in den Jahren 1982 - 1986 am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Tübingen.

Herrn Prof. Dr. O. E. Rössler danke ich herzlich für seine Anregung zu dieser Arbeit, für sein ständiges Interesse und seine engagierten Diskussionen.

Herrn Prof. Dr. F. F. Seelig danke ich für die Unterstützung der Arbeit durch Institutsmittel.

Für die hervorragenden Arbeitsbedingungen am Institut und die freundliche Atmosphäre bin ich ihnen, sowie allen Mitarbeitern sehr dankbar.

Herrn Dr. R. King danke ich für die Diskussion des Reaktions-Modells und seine Anregung zur numerischen Integration der Differentialgleichungen des Modells.

Ebenso gilt mein Dank Frau E. Fischer, welche großzügig meinen Wünschen nach größerer Rechenkapazität und Rechenzeit nachgekommen ist, sowie den Benutzerberatern des Rechenzentrums der Universität Stuttgart, die mit unendlicher Flexibilität die diversen Probleme mit Humor und Geschicklichkeit aus dem Wege räumten.

Nicht zuletzt danke ich meiner Frau für das Korrekturlesen und vor allem für ihre liebevolle Geduld.

Abstract

Musterle, Wilfried

Entwicklung eines multivariablen, graphischen Displays zur Überwachung eines chemischen Reaktors.

Es wird der Entwurf eines graphischen Displays vorgestellt, das die multivariablen Daten eines chemischen Reaktors in Form von emotionalen, mimischen Ausdrücken anzeigt. Die Anzeige ist selbsterklärend. Sie ist im Zusammenspiel mit einem chemischen Reaktormodell als intelligentes Ausgabemedium konzipiert, das Pattern-Recognition-Funktion aufweist. Zur Steigerung der Ergonomie werden wahrnehmungspsychologisch wirksame, emotionale Gesichter verwendet, welche die Basisemotionen Freude, Furcht, Überraschung, Wut und Trauer darstellen. Ekel-Mimik findet keine Anwendung. Als Freude mit hoher Intensität tritt Lachen in Erscheinung.

Das mathematische Reaktor-Modell beschreibt eine angenommene chemische Reaktion erster Ordnung, durchgeführt in einem Rührkesselreaktor mit Temperatur-Regelung im Batch-Betrieb.

Die entwickelten Programme beinhalten das Reaktormodell und den Mimik-Simulator. Sie sind in FORTRAN 5 formuliert. Beide Programme arbeiten in der vorliegenden Form im Off-Line-Betrieb zusammen und sind somit auch unabhängig anwendbar.

Abstract

Musterle, Wilfried

Design of a Multivariate, Graphical Display to Supervise a Chemical Reactor.

A graphical display is proposed which shows the multivariate data of a chemical reactor as emotional facial expressions. The display is self-explanatory. In combination with a mathematical model of a chemical reactor the display is an intelligent output device with pattern recognition functions. To increase ergonomics highly significant emotional facial displays are used which are happiness, fear, surprise, anger and sadness. The disgust display is not used. Laugher appeared as happiness with high intensity.

The mathematical process model describes a first-order reaction applied to a simple batch reactor with temperatur control.

The reactor simulation program and the facial action simulator are written in FORTRAN 5 They works off-line, so they can be used independent. In the appendix some usefull data files are listed.

Inhalt

1. Einleitung 7

2. Theoretischer Teil 10
2.1 Reaktormodell 10
2.1.1 Parametrische Empfindlichkeit 14
2.2 Zustandserkennung 21
2.2.1 Prozeß-Überwachung 25
2.3 Ergonomie 26
2.4 Multivariable Anzeigen 29
2.5 Ergonomische Untersuchungen 45
2.6 Bedeutungsvolle als Reaktorzustandsdisplays 49

3. Praktischer Teil 86
3.1 Darstellung 86
3.2 Methode 87
3.3 Basis-Displays 93

4. Ausblick 94

5. Hardware und Software 97
5.1 Das Reaktionsmodell-Programm 99
5.2 Das Mimik-Programm 100

6. Literaturverzeichnis 106

7. Anhang 114

7.1 Simulationsprogramme 114

7.2 Bildsequenz-Daten (unkritisch)..(Datenfile).....115

7.3 Bildsequenz-Daten (kritisch)....(Datenfile).....116

7.4 Verzeichnis der verwendeten Symbole 117

7.5 Verzeichnis der Abbildungen 118

7.6 Verzeichnis der Tabellen 119

8. Lebenslauf 120

9. Akademische Lehrer 121

1. Einleitung

Die Prozeßführung moderner chemischer Anlagen versucht über eine Optimierung der für die chemische Reaktion wesentlichen Parameter die Produktausbeute zu maximieren. Wirtschaftliche Gründe sind dafür entscheidend. Katalyse, hoher Druck und hohe Temperaturen sind charakteristische Merkmale einer solchen Prozeßführung. Es ist dabei zwangsläufig, daß bei stark exothermen Reaktionen gefährliche Reaktionszustände vorkommen können, insbesondere, wenn eine nichtlineare Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit von den Zustandsvariablen vorliegt. Um diese Reaktionen sicher und optimal betreiben zu können, sind Meßeinrichtungen erforderlich, die es gestatten, kritische Prozeßzustände bereits im Stadium ihres Entstehens zu erkennen, damit rechtzeitig geeignete Gegenmaßnahmen ergriffen werden können.

Bei der Überwachung chemischer Prozesse ist häufig die Kenntnis nicht meßbarer Größen zur Beurteilung des Reaktorzustandes notwendig. In der chemischen Produktion sind vor allem die Konzentrationen der einzelnen Stoffe schwer meßbar, welche nur mit erheblicher Zeitverzögerung durch chromatographische oder spektroskopische Methoden zugänglich sind. Für stochastische Probleme hat KALMAN (1960) entscheidend zur Rekonstruktion nichtmeßbarer Größen mit Hilfe des sog. KALMAN-Filters beigetragen. Ein mehr heuristischer Ansatz für deterministische Probleme dieser Art wurde später von LUENBERGER (1966) in Form des sog. Beobachters entwickelt. Dabei wird unter Zuhilfenahme von Apriori-Wissen über das Prozeßgeschehen ein mathematisches Modell der

chemischen Anlage geschaffen, welches den Gesamtzustand der Anlage aus wenigen, leicht zugänglichen Meßgrößen, wie z.B. der Temperatur, rekonstruiert (ZEITZ, 1977).

Die Anwendung dieser Filter oder Beobachter findet in der Luft und Raumfahrt mit großem Erfolg statt (GILLES, 1979; JUEN und ZEITZ, 1985). Im Gegensatz dazu ist ihre Verbreitung in der Verfahrenstechnik noch gering. Ein Grund hierfür könnte in Widerständen gegenüber systemtheoretischen Methoden liegen, ein anderer in der Komplexität der physikalischen Prozesse, wie z.B. Stofftransport, Strömungsverhältnisse, Diffusion oder Wärmeleitung sowie in der Schwierigkeit bei der Mathematisierung komplexer chemischer Reaktionen (GILLES, 1979). Selbst bei Würdigung aller Probleme, die bei der praktischen Realisierung zu überwinden sind, bleiben diese Argumente jedoch gegenüber den Fortschritten der Systemdynamik nicht mehr haltbar. Es existieren neben einfacheren, praxisnahen Modellen (z.B. GILLES, 1976, 1977; GILLES und SCHULER 1981) auch bereits mathematische Ansätze zur Behandlung chaotischen Reaktorverhaltens (RÖSSLER, 1976; KAHLERT, RÖSSLER und VARMA, 1981).

Die Kenntnis der mittels KALMAN-Filter oder LUENBERGER-Beobachter ermittelten gesamten Prozeßdaten erlaubt sowohl eine Darstellung des gesamten augenblicklichen Reaktorzustandes, als auch eine prädiktive Aussage über den zukünftigen Reaktionsverlauf. Eine frühzeitige Erkennung gefährlicher Reaktionszustände ist auf diese Weise möglich.

Die Erkennung kritischer Zustände ist leicht automatisierbar (SCHULER, 1982). Darüberhinaus muß das Wachpersonal in geeigneter Weise über den Prozeßzustand informiert werden, um die Entwicklung des Prozesses verfolgen und überwachen

zu können, damit Alarmzustände vor deren Eintreffen verhindert werden können. Ein leicht interpretierbares, wenig ermüdendes Anzeigemedium ist dabei notwendige Voraussetzung.

Mit der zunehmenden Anwendung elektronischer Datenverarbeitung in der chemischen Verfahrenstechnik in Form von Prozeßrechnern vergrößert sich die darstellbare Datenmenge drastisch. Im gleichen Maße erhöht sich die wahrzunehmende Informationsmenge. Die Darstellung dieser Daten entspricht jedoch bisher in den meisten Fällen nicht den Bedürfnissen der menschlichen Wahrnehmungsfähigkeit, so daß Fehlfunktionen bei der Überwachung immer wieder auftreten können.

Es wird in der vorliegenden Arbeit ein ergonomisches, multivariables Überwachungs-Display für einen chemischen Reaktor vorgestellt, das die klassischen Anzeigen ergänzen soll, um deren Nachteile und Schwächen zu beseitigen. Nach einer ausführlichen Diskussion eines typischen Reaktormodells werden verschiedene, klassische multivariable Anzeigen vorgestellt und miteinander verglichen. Da es bei der Kommunikation im Mensch-Maschine-System auch psychologische Aspekte zu berücksichtigen gilt, werden auch Ergebnisse derartiger Untersuchungen angesprochen. Schließlich folgt die Beschreibung der Entwicklung und Funktion des neuen Anzeigemediums.

Im Anhang sind Datenfiles für die Erzeugung von Bildsequenzen aufgelistet.

2. Theoretischer Teil

2.1 REAKTOR-MODELL

Jede chemische Reaktion kann als Stoffumsatz interpretiert werden. Mit dem Stoffumsatz ist ein Energieumsatz verbunden, der sich als Wärmetönung der Reaktion äußert. Das Modell eines chemischen Prozesses (GILLES und SCHÜLER, 1981) kann daher durch eine Material- und Energiebilanzgleichung vollständig beschrieben werden. Verläuft die Reaktion nach einer Formalkinetik erster Ordnung, ergibt sich folgender Ansatz:

Reaktion:

$$A \text{ -------} > B \quad : \quad \Delta H < 0 \qquad (1)$$

Materialbilanz:

$$\frac{dc_A(t)}{dt} = -r(c_A(t), T(t)) \qquad (2)$$

mit $c_A(0) = c_{A0}$ und $T(0) = T0$.

Die Materialbilanz der Reaktionsgleichung (1) mit einer Formalkinetik n-ter Ordnung wird in ihrer Dynamik durch die Reaktionsgeschwindigkeit r beschrieben:

$$r(c_A(t), T(t)) = k0 * c_A(t) * \exp(-E/(R * T(t))) \qquad (3)$$

Sie hängt nach ARRHENIUS und VAN'T HOFF, Gl.(3), von der Temperatur T ab. Die Umsetzung erfolgt diskontinuierlich in einem Rührkesselreaktor, dessen allgemeines Schema Abb. 1 zeigt.

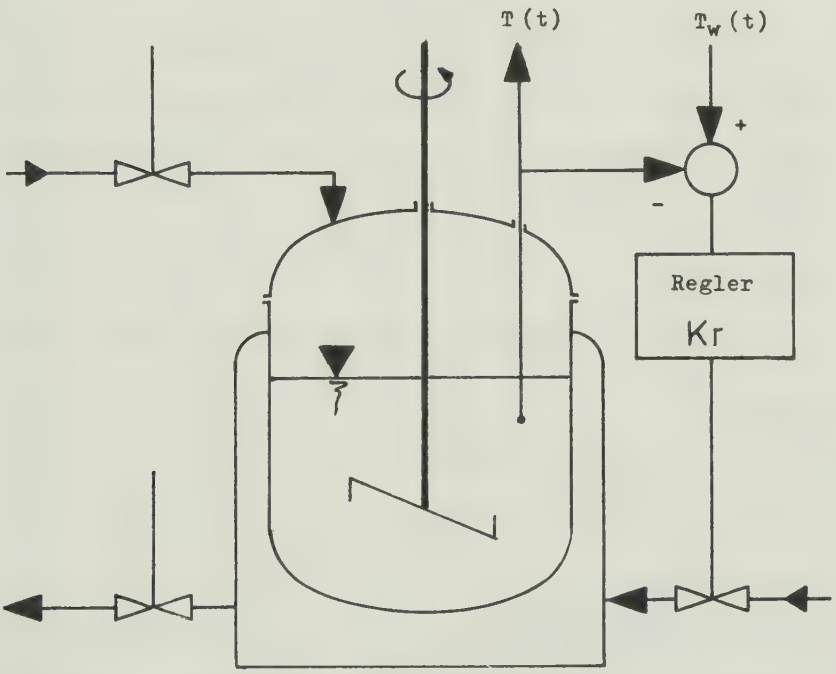


Abb. 1: Vereinfachtes Schema eines Rührkessel-Reaktors mit Mantelkühlung und Temperatur-Regelung.
T(t) stellt den Temperatur-Meßwert (Ist-Wert) dar und
Tw(t) einen vorgegebenen Temperatur-Sollwert.

Die Energiebilanz eines isobaren Prozesses ergibt sich aus der Summe der Reaktionswärme Q_R und der Kühlung. Die Kühlung wird durch den Wärmedurchgang THETA beschrieben, welcher von der Kühlkenngröße kw*Fk mit den beiden Konstanten kw (Wärmedurchgangszahl) und der Kühlfläche Fk abhängt, sowie von der Kühltemperatur Tk . Die Kühlung ist außerdem umso wirksamer, je größer die Differenz zwischen der Kühltemperatur Tk und der Temperatur T des Reaktionsgemenges ist.

Kühlung:

$$THETA = kw * Fk\ (Tk - T) \qquad (4)$$

Energiebilanz:

$$dQ / dt = THETA + dQr / dt \qquad (5)$$

$$Cp * dT / dt = kw * Fk\ (Tk-T) + (-delta\ Hr) * r_A(c_A, T) * V \qquad (6)$$

mit der Reaktionsgeschwindigkeit

$$r_A(c_A, T) = kO * c_A(t) * \exp(-E/(R * T)) \qquad (3)$$

Die Regelung des Reaktors erfolgt über die Temperatur, wobei ein Proportionalregler mit dem Proportionalitätsfaktor Kr (vergl. Abb. 1) angenommen werden kann. Mit einem, gebenenfalls zeitabhängigen Temperatursollwert Tw gilt das Regelgesetz:

$$Tk - Tw = - Kr\ (T - Tw) \qquad (7)$$

Zur Vereinfachung und Normierung dienen die dimensionslosen Variablen X1 für den Reaktionsfortschritt (Anfangswert X1(0) = X10) und X2 für die Temperatur (Anfangswert X2(0) = X20), sowie die dimensionslose Zeit tau.

$$X1(t) = (c_{A0} - c_A(t)) / c_{A0} \quad (8)$$

$$X2(t) = (T(t) - Tw) / Tw * E/(R * Tw) \quad (8)$$

$$tau(t) = t * k0 * exp(- E/(R * Tw)) \quad (8)$$

Die DGL des geregelten Reaktors haben damit folgende Form:

$$dX1 / dtau = r(X1(tau), X2(tau)) \quad (9)$$

$$dX2 / dtau = a * r(X1(tau), X2(tau)) - b * X2(tau) \quad (9)$$

$$r(X1,X2) = (1-X1) * exp(X2 /(1 + X2/c)) \quad (9)$$

Das angenommene Prozeßmodell der Gleichungen (9) enthält vier dimensionslose Parameter. Die Größe "a" stellt die adiabatische Temperaturerhöhung dar. Die Kühlintensität wird durch "b" ausgedrückt, während "c" den reaktionsabhängigen Arrhenius-Faktor darstellt. X20 ist die Anfangstemperatur des Reaktors

$$a = ((-delta H)* c_{A0} * V) / (Cp * Tw) * c \quad (10)$$

$$b = (kw * Fk (1+Kr) / (Cp * k0 * exp(-c)) \quad (10)$$

$$c = E / (R * Tw) \quad (10)$$

$$X20 = (T0 - Tw) / Tw * c \quad (10)$$

2.1.1 Parametrische Empfindlichkeit

Chemische Reaktionen und damit auch deren mathematische Modelle weisen häufig eine hohe Empfindlichkeit gegenüber Parameteränderungen auf (WICKE, 1974; DENZEL und SEELIG, 1978). Das dynamische Verhalten des Reaktormodells der Gl. (9) von GILLES und SCHULER (1981) zeigt ebenfalls eine hohe parametrische Empfindlichkeit. Die Grenzfälle ergeben sich für verschwindende Werte der Reaktionswärme (a = 0) bzw. Kühlung (b = 0). Bei verschwindender Reaktionswärme fällt die Reaktor-Temperatur X2 expotentiell auf den stationären Endwert X2 = 0 ab sofern die Anfangstemperatur X20 > 0 ist, während der Reaktionsfortschritt nach zunächst heftigem Anstieg nur sehr langsam gegen den Endwert X1 = 1 konvergiert. Entropie-Effekte werden nicht berücksichtigt. Ohne Kühlung (b = 0, adiabatischer Grenzfall) ergibt sich eine unkontrollierte, sich selbstbeschleunigende Reaktion. Die Bilder Abb. 2 mit a = 0 und Abb. 3 mit b = 0 zeigen das Verhalten des Reaktors in diesen Grenzsituationen.

Bei endlichen Werten für a und b finden sich die Betriebsbedingungen des Reaktors. Sie liegen im Verhalten zwischen den genannten Grenzfällen. Bei hoher Kühlintensität durchläuft die Temperatur (X2) ein flaches Maximum, um sich langsam dem stationären Endwert X2 = 0 anzunähern (Abb. 4, 5 und 6). Der Stoffumsatz X1 wächst nur langsam an. Bei starker Wärmetönung (Abb. 4), d.h. bei großem Wert von a, oder geringer Kühlintensität (Abb. 5), also bei kleinem Wert von b, überwiegt zunächst die durch die Reaktion erzeugte Wärme. Infolgedessen steigen Temperatur X2 und Stoffumsatz X1 ähnlich schnell, wie im adiabatischen Grenzfall, bis zum vollständigen Verbrauch des Ausgangsstoffes A. Durch Wärmeabgabe an das Kühlmedium sinkt schließlich die

Reaktortemperatur wieder ab (X2 = 0). Es gibt einen empfindlichen Bereich, in dem bereits eine geringe Erniedrigung des Kühlparameters b genügt, um eine drastische, qualitative Verhaltensänderung des Reaktors zu bewirken: Die unkritische, und kontrollierte Reaktion geht in eine durch Selbstbeschleunigung charakterisierte Reaktion über: Der Reaktor wird unkontrolliert kritisch (vergl. Bild 5). Ähnliches gilt für die Einfülltemperatur X20. Auch hier existiert eine Temperaturschwelle (vergl. Bild 6), deren Überschreitung zu kritischem Verhalten führt.

Auf den folgenden Seiten:

Abb. 2: Grenzsituation des Reaktorverhalten bei verschwindender Reaktionswärme (a = 0). ... S. 16

Abb. 3: Grenzsituation des Reaktorverhalten bei verschwindender Kühlung (b = 0). ... S. 17

Abb. 4: Reaktorverhalten bei Variation der adiabatischen Temperaturerhöhung a. Heftigste Reaktion dargestellt bei a = 15.5 . .. S. 18

Abb. 5: Reaktorverhalten bei Variation der Kühlintensität b. Heftigste Reaktion dargestellt bei b = 21.0 . ... S. 19

Abb. 6: Reaktorverhalten bei Variation der Zulauftemperatur X20. Heftigste Reaktion dargestellt bei X20 = 1.3 ... S. 20

Abbildung 2

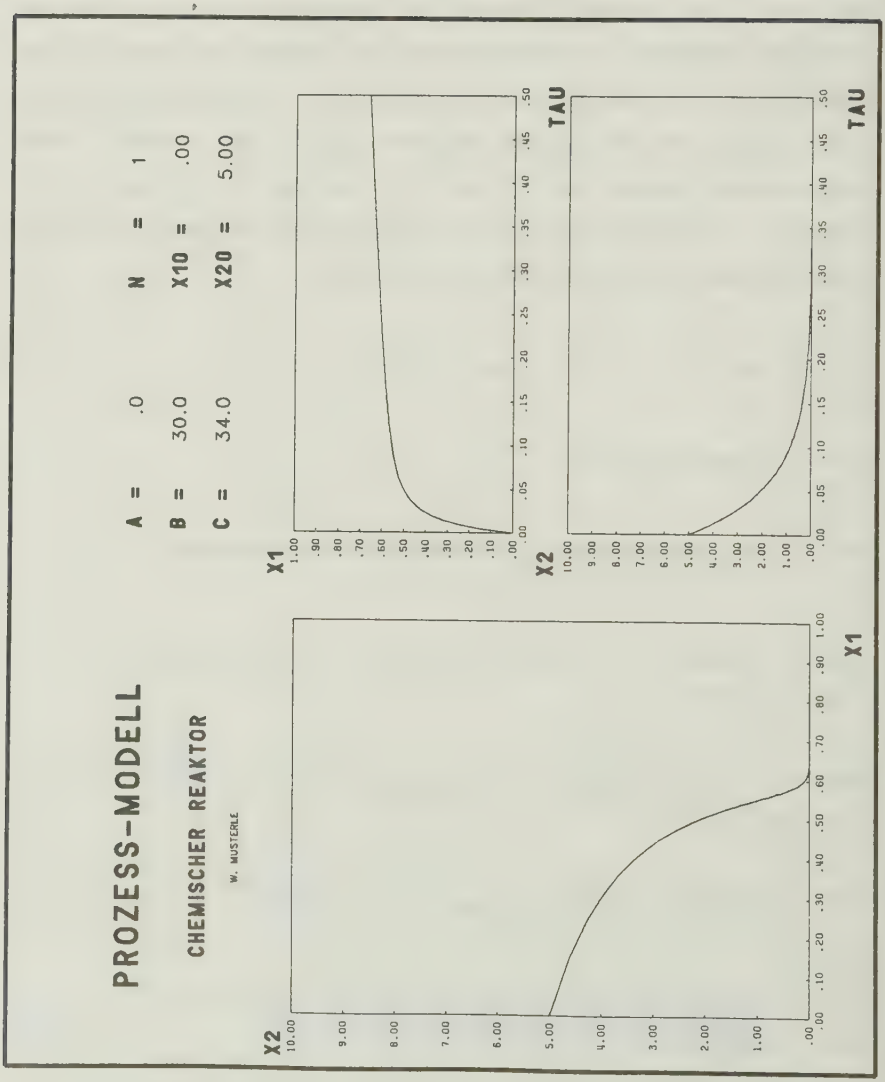

PROZESS-MODELL
CHEMISCHER REAKTOR
W. MUSTERLE
A = .0
B = 30.0
C = 34.0
N = 1
X10 = .00
X20 = 5.00
X1
X2
TAU

Abbildung 3

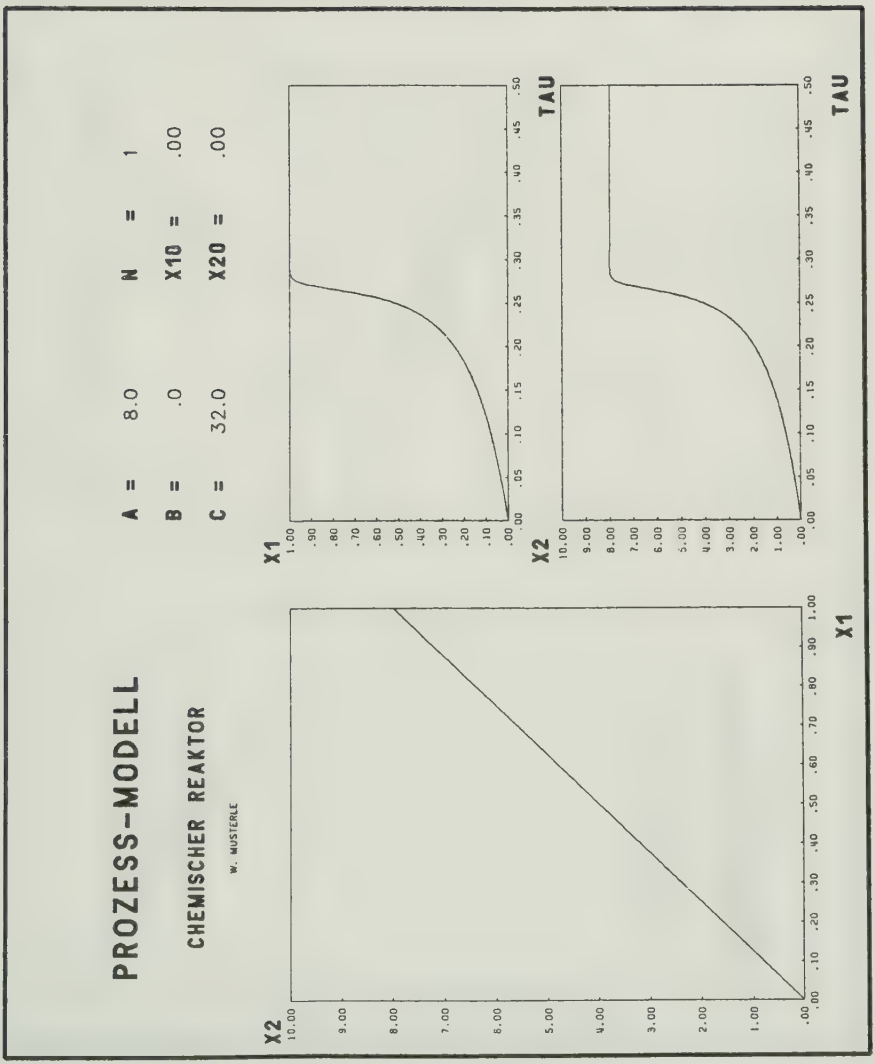

PROZESS-MODELL
CHEMISCHER REAKTOR
W. MUSTERLE
A = 8.0
B = .0
C = 32.0
N = 1
X10 = .00
X20 = .00
X1
X2
TAU

Abbildung 4

PROZESS-MODELL
CHEMISCHER REAKTOR
W. MUSTERLE
A-VAR: 14.5 BIS 15.5 STEP 0.1
A = N = 1
B = 23.0 X10 = .00
C = 34.0 X20 = .00
X2
X1
15.5
14.5
X1
X2
TAU
15.5
14.5
TAU

Abbildung 5

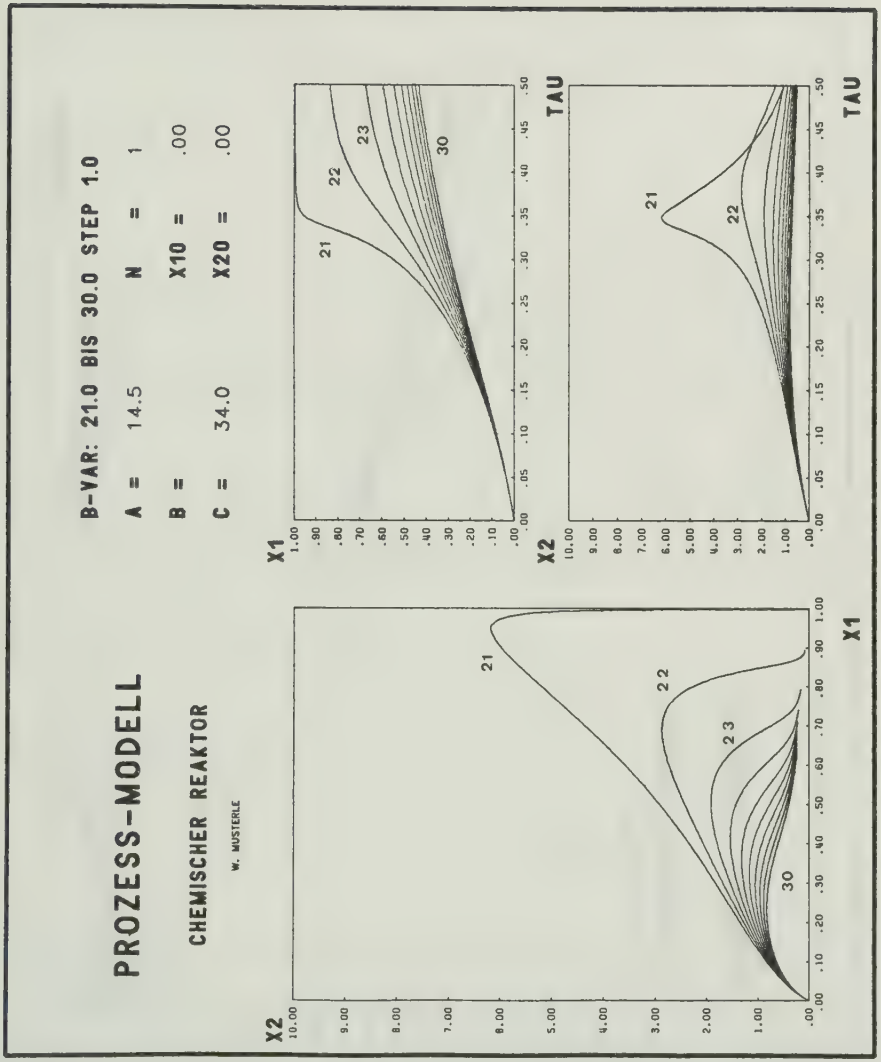
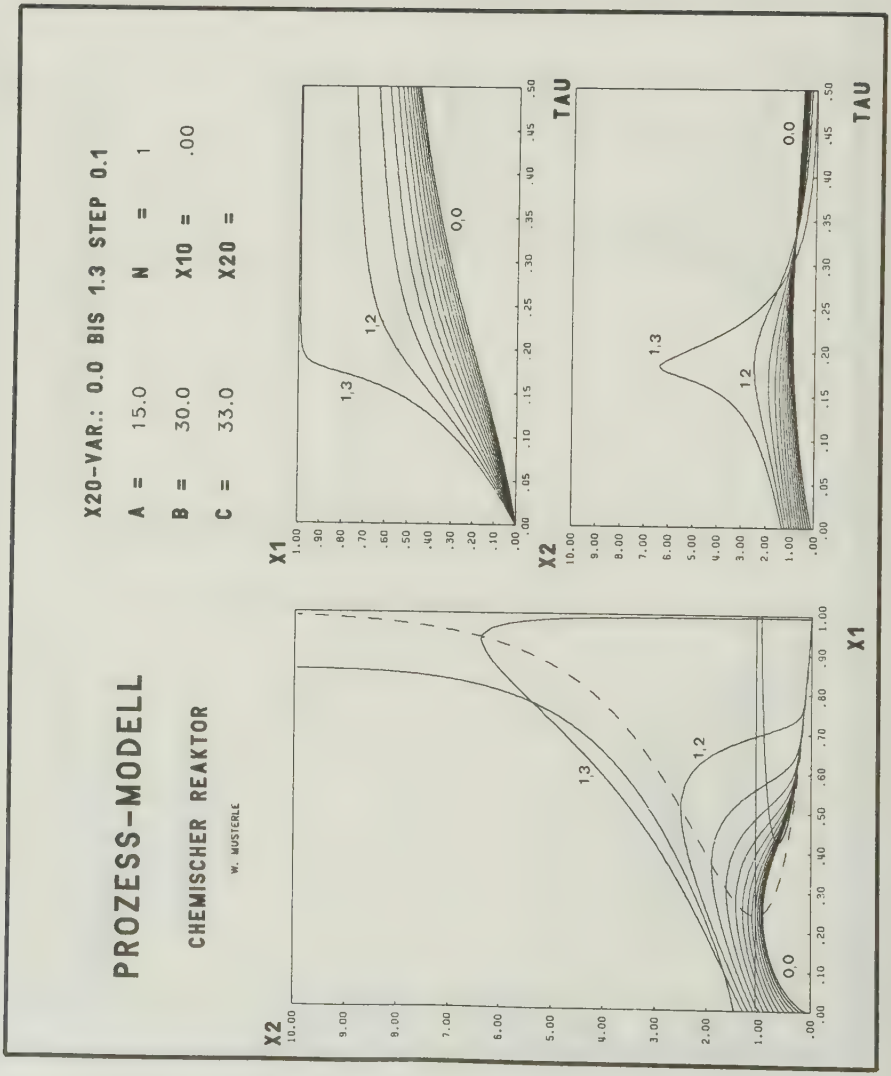

PROZESS-MODELL
CHEMISCHER REAKTOR
W. MUSTERLE
B-VAR: 21.0 BIS 30.0 STEP 1.0
A = 14.5
N = 1
B =
X10 = .00
C = 34.0
X20 = .00
X2
X1
21
22
23
30
X1
TAU
X2
TAU
21
22

Abbildung 6


PROZESS-MODELL
CHEMISCHER REAKTOR
W. MUSTERLE
X20-VAR.: 0.0 BIS 1.3 STEP 0.1
A = 15.0
N = 1
B = 30.0
X10 = .00
C = 33.0
X20 =
X2
X1
X1
TAU
X2
TAU
1.3
1.2
0.0

2.2 Zustandserkennung

Aus dem beschriebenen Verhalten lassen sich nun Kriterien ableiten, welche eine Zustandsbeurteilung zulassen. In besonderem Maße ist der Temperaturverlauf geeignet, kritische und unkritische Reaktionsverläufe zu diskriminieren.

Die Ortskurve aller Temperaturmaxima Tmax teilt die Phasenebene in zwei Bereiche wie es die Abb. 7 zeigt: in ein Gebiet mit positiver Steigung der Trajektorien (Erwärmung: horizontal schraffiert) und in ein Gebiet mit negativer Steigung (Abkühlung: vertikal schraffiert).

Die entsprechenden Bedingungen für die beiden Temperaturbereiche lauten:

Temperaturanstieg: $dX2 / dtau > 0$

Temperaturabfall : $dX2 / dtau < 0$

Mit Berücksichtigung der Gl. (9) ergibt sich nach GILLES und SCHULER (1981) für das Temperaturmaximum bezüglich der Zeit tau: $dX2 / dtau = 0$:

$$X1 = 1 - b/a * X2 * \exp(- X2 /(1+X2/c)) \qquad (11)$$

Kritische Prozeßzustände treten nur im Bereich der Temperaturzunahme auf. Charakteristisch sind dabei sich selbstbeschleunigende Reaktionen, d.h. bei gleichem Stoffumsatz steigt die Temperaturzunahme an. Dieses Verhalten läßt sich aus der Krümmung der Phasenbahn (Trajektorie i.d. Phasenebene) erkennen,

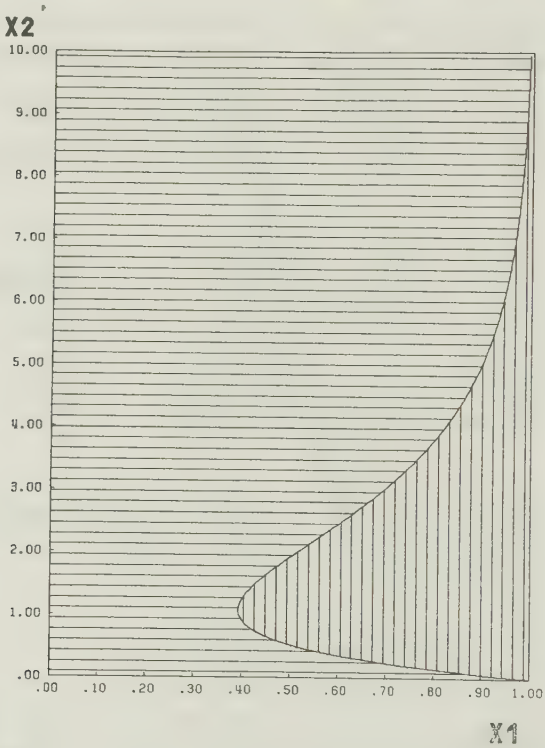


Abb. 7: Phasenebene mit der Ortskurve der Maxima-Temperatur für die Werte: a = 15, b = 24, c = 34 und n = 1.

wobei die Ortskurven der Wendepunkte die Phasenebene in Gebiete mit positiver und negativer Krümmung unterteilen. Die Bedingung der Grenzkurve ergibt sich zu

$$d\,X2^{2} / d\,X1^{2} = 0$$

woraus sich mit n = 1 aus Gl. (9) die kritische Grenzkurve in Abweichung zu GILLES und SCHULER (1981) explizit berechnen läßt:

$$X1 = 1 - X2/a \left(b * \exp(-z) + 1/(1 + z^2/c - z) \right) \qquad (12)$$

mit $z = X2 / (1 + X2/c)$

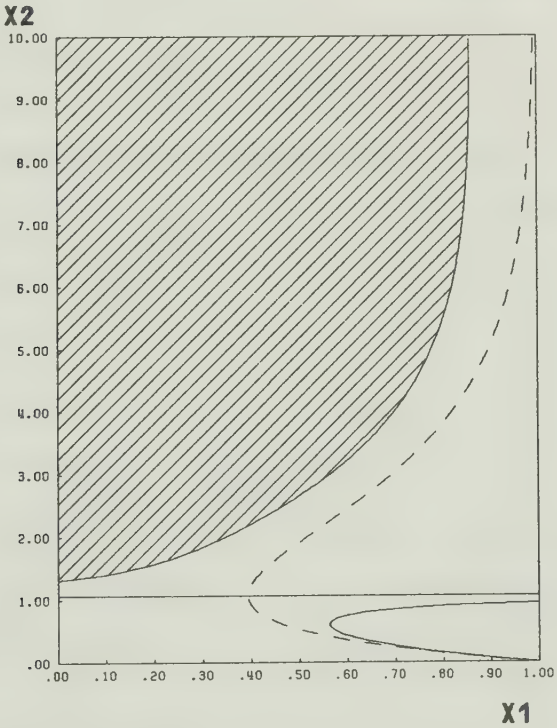


Abb. 8: Phasenebene mit dem Kritischen Gebiet (schraffiert) für die Werte a = 15, b = 24, c = 34 und n = 1.

Als gefährliche Reaktionszustände werden alle Punkte der Phasenebene definiert, für die gilt:

$$\frac{dX2}{dX1} > 0 \quad \text{und} \quad \frac{d^2X2}{dX1^2} > 0$$

Bild 8 zeigt das Gebiet in der Phasenebene, in dem obige Bedingung erfüllt sind, schraffiert. Dieses Gebiet der Phasenebene muß bei der Prozeßführung gemieden werden (verbotene Zone).

Wird der chemische Prozeß durch ein zeitabhängiges Temperaturprogramm des Temperatursollwertes Tw = Tw(tau) gesteuert, führt dies auch zu einer Änderung der Form aller genannten Grenzlinien und damit auch zu einer zeitabhängigen Änderung der verbotenen Zone.

2.2.1 Prozeß-Überwachung

Bei realen Prozessen treten stets Abweichungen vom idealen Verhalten des Reaktormodelles auf. Das mathematische Modell wird daher durch Aufnahme stochastischer Stoff- und Wärmequellen in Form von Prozeßrauschen, sowie Meßrauschen dem realen Prozeß angeglichen. Es ergibt sich daraus ein sog. Zustandsschätzer (KALMAN-Filter), der den vollständigen Prozeßzustand gut wiedergeben kann (GILLES, 1979). Das Reaktorverhalten wird durch diese Zusatzannahmen nicht verändert.

Die Existenz eines Prozeßmodells ermöglicht es nicht nur schwer meßbare Größen abzuleiten, sondern mit Hilfe des aktuellen Prozeßzustandes eine Berechnung des zu erwartenden, zukünftigen Reaktorzustandes durchzuführen. Der augenblickliche Zustand liefert dabei die Anfangsbedingungen für die Modellrechnung mit den Gleichungen (9) und (10) (vergl. GILLES und SCHULER, 1981). Die Anfangswerte X10 und X20 sind dabei von Null verschieden und nehmen die Werte des augenblicklichen Reaktorzustandes an. Prädiktionen dieser Art und Genauigkeit sind ohne mathematisches Modell in Form eines KALMAN-Filter oder eines LUENBERGER-Beobachter nicht möglich. Gefährliche Zustände lassen sich damit bereits zu Beginn des Prädiktionsintervalls erkennen (mit der Einschränkung, daß keine unvorhergesehenen Störfälle in diesem Zeitraum eintreten).

2.3 Ergonomie

Der Mensch verarbeitet hauptsächlich optische Informationen. Mit 100 Millionen Bit pro Sekunde liefert der visuelle Kanal weit mehr Informationen als die restlichen Sensoren zusammen: Abb. 9 nach FRANK, 1970 (vergl. auch ENTWISLE und HUGGINS, 1973). Die Anzeige soll übersichtlich und gut gegliedert sein, um Ermüdung und Konzentrationsschwächen auszuschalten. Dementsprechend muß eine graphische oder bildliche Repräsentation der Reaktordaten zur Kommunikation mit dem Wachpersonal angestrebt werden.

Klassische Anzeigen der Prozeßüberwachung versuchen die Reaktionsapparatur in Form eines Prozeßschemas darzustellen, welches die Meßwerte und Zustandsvariablen an geeigneter Stelle enthält. Die Darstellung erfolgt in Wandgröße, oder bei neueren Anlagen auf dem Bildschirm (vergl. Bild 10). Eine schnelle Diagnose des gesamten Reaktorzustandes ist bei dieser Prozeßrepräsentation aufwendig und zeitraubend, andernfalls unvollständig. Sie besteht in der Regel im Absuchen des Bildschirms nach rot blinkenden Parametern, die einen kritischen Schwellenwert überschritten haben.

Sehr wünschenswert wäre daher ein zusätzliches multivariables Display, das den Reaktorzustand schnell und zuverlässig diagnostizieren läßt, so daß direkt eine Gegenmaßnahme ergriffen werden kann.

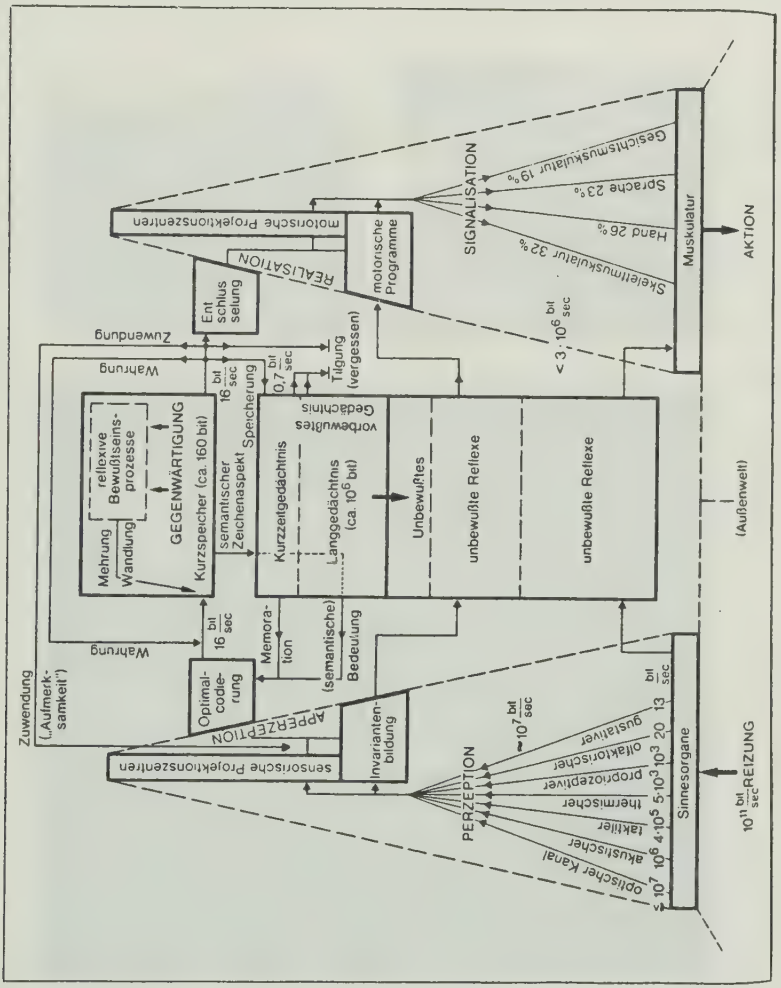


Abb. 9: Informationsfluß im menschlichen System (aus FRANK, 1970).

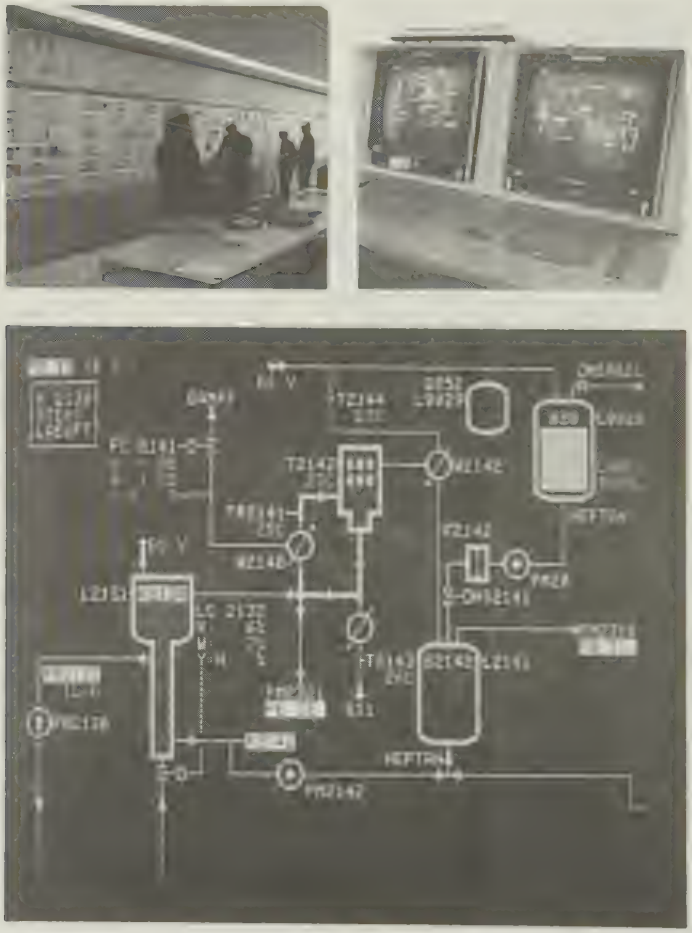


Abb. 10: Moderne Meßwarte in der Chemischen Industrie (BASF)

2.4 Multivariable Anzeigen

Es existieren verschiedene Versuche zum Design multivariabler Anzeigen (vergl. CAROL, 1978: MEZZICH und WORTHINGTON, 1978). Die einfachste Darstellung multivariabler Daten ist dabei deren direkte, digitale Wiedergabe. Ein Vergleich diverser ölgesellschaften (Tab. 1) soll zur Illustration des 'State-of-the-Art' multivariabler Anzeigen dienen (BRUCKNER, 1978). Betrachtet man die rein numerische Anzeige der Tab. 2a, so ist eine Beurteilung der Gesellschaften erst nach langem Vergleich der einzelnen Angaben möglich. Alle genannten negativen, ergonomischen Aspekte treffen hier zu. Diese Darstellungsart von Daten kann daher von jeder weiteren Diskussion ausgeschlossen werden.

Tabelle 1: Bezeichnung einiger ölgesellschaften
(aus BRUCKNER, 1978, 1979)

NAME	COMPANIES
UNION	Union, Pure Oil, Pure Transportation Company
GETTY	Getty, Skelly
MOBIL	Mobil, Magnolia Petroleum
TEXACO	Texaco, Texaco Seaboard
CHEVRON	Chevron, California Company, Standard Oil of Texas
GULF	Gulf, British Americal Oil
SHELL	Shell, Shell P/L Corporation
EXXON	Exxon, Humble, Exxon Pipeline Company

Tab. 2: Fünfzehn Parameter der Ölgesellschaften aus Tab. 1.
(aus BRUCKNER, 1978, 1979)

Company Group Name	Variable														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
UNION	.53	1.2	.49	203	47	4	4.2	1.22	103	99	.19	527	.98	8.5	38
GETTY	.54	1.0	.32	197	31	11	4.0	.67	51	57	.11	160	.38	2.8	26
MOBIL	1.21	2.8	.50	211	50	8	3.9	1.04	68	78	.06	339	.81	4.0	25
TEXACO	1.16	2.7	.56	176	66	8	7.8	.31	56	50	.04	277	.91	2.5	34
CHEVRON	.84	1.2	1.16	378	70	13	5.8	.70	197	141	.17	355	.50	1.6	32
GULF	1.01	2.2	.67	219	65	11	4.1	1.53	338	235	.23	481	.83	2.9	37
SHELL	.97	1.7	1.59	336	95	13	3.6	1.90	430	378	.39	656	.38	2.7	54
EXXON	1.44	2.9	1.02	250	84	8	5.2	.99	276	199	.14	609	.58	4.3	36

Tabelle 3: Beschreibung der Parameter aus Tab. 2.

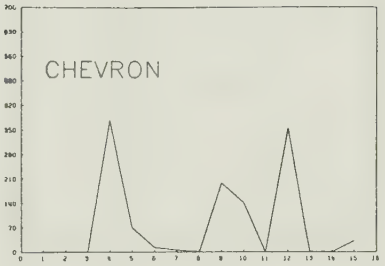
(aus BRUCKNER, 1978, 1979)

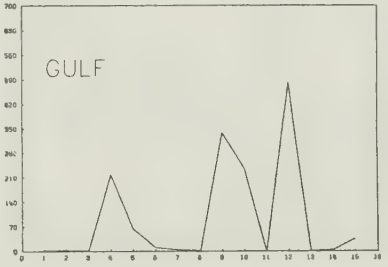
1	Net Bonus	Total net dollars paid (in billions)
2	Excess $/Lease	Average gross dollars paid above 2nd highest bid (in millions).
3	Net acreage	Total net acres leased (in millions)
4	No. leases won	Number of leases won
5	Avg. Ownership	Average percent of ownership of leases
6	Pct. Prod. Leases won	Percentage of leases, ultimately found to be producing, won by the company
7	Avg. Yrs. to Prod.	Average number of years between sale and first production (production lag)
8	Net Gas Prod.	Net gas production (in trillion cubic feet)
9	Net Liq. Prod.	Net liquid production (in millions of barrels)
10	Net Royalty	Net royalty paid to government (in millions)
11	Royalty/Bonus	Net royalty/number of years of production (in thousands)
13	R**2:Roy/Pyr.	Square of correlation coefficient from multiple linear regression of royalty/ prod. yr. on bidding data, production lag and years of production (for producing leases only)
14	Roy/Pyr/Pr.Ac.	Royalty/production year/producing acre (in dollars)
15	Pct. Leases Term-ted	Percentage of owned leases terminated

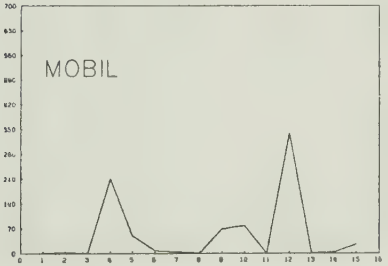
Demgegenüber stellt das lineare Datenprofil den einfachsten Fall einer graphischen Repräsentation dar. Ein multidimensionaler Punkt P(X1,X2,...,Xn) wird dabei durch einen polygonalen Linienzug wiedergegeben, dessen Spitzen die einzelnen Werte Xi sind. Die Werte werden in definierter Reihenfolge, äquidistant entlang einer Basislinie in horizontaler oder vertikaler Richtung geordnet, abgetragen. Bild 11 zeigt eine Reihe solcher linearer Profile für die oben erwähnten Ölgesellschaften mit jeweils 15 Variablen. Die Probleme der gemeinsamen Darstellung kleiner Werte (hier: 0.04) und großer Werte (hier: 656) in einem Diagramm können durch Wahl eines logarithmischen Maßstabs entschärft werden, wie es Abb. 12 zeigt.

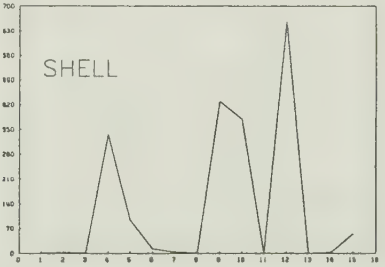
Das zirkuläre Datenprofil (Polar-Diagramm) von HERMAN und MONTROLL (1972) oder SIEGEL, GOLDWYN und FRIEDMAN (1971) ist eine Variation des linearen Profils. Anstelle der äquidistanten Anordnung entlang einer Basislinie werden die Variablen radial um ein Zentrum geordnet und miteinander verbunden, wobei der Winkel zwischen den Radialstrahlen konstant bleibt (vergl. Bild 13). Es entstehen dabei geschlossene Polygone, die bei stark schwankendem Datensatz sternförmiges Aussehen bekommen. Auch hier kann im Bedarfsfall ein logarithmischer Maßstab - wie in Abb. 14 - in radialer Richtung verwendet werden.

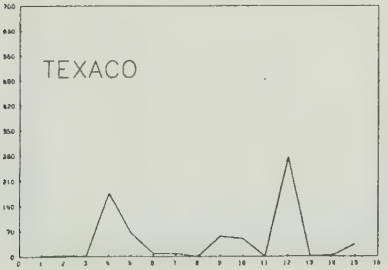
In beiden Fällen werden mehrdimensionale Daten sequentiell auf die zweidimensionale Darstellungsebene abgebildet. Jede Dimension bleibt dabei einzeln erhalten.











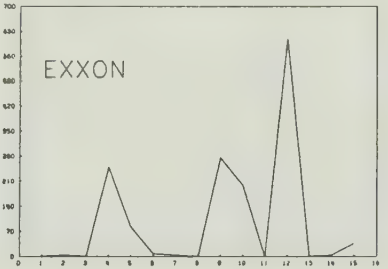


Abb. 11: Lineare Datenprofile (linearer Maßstab).

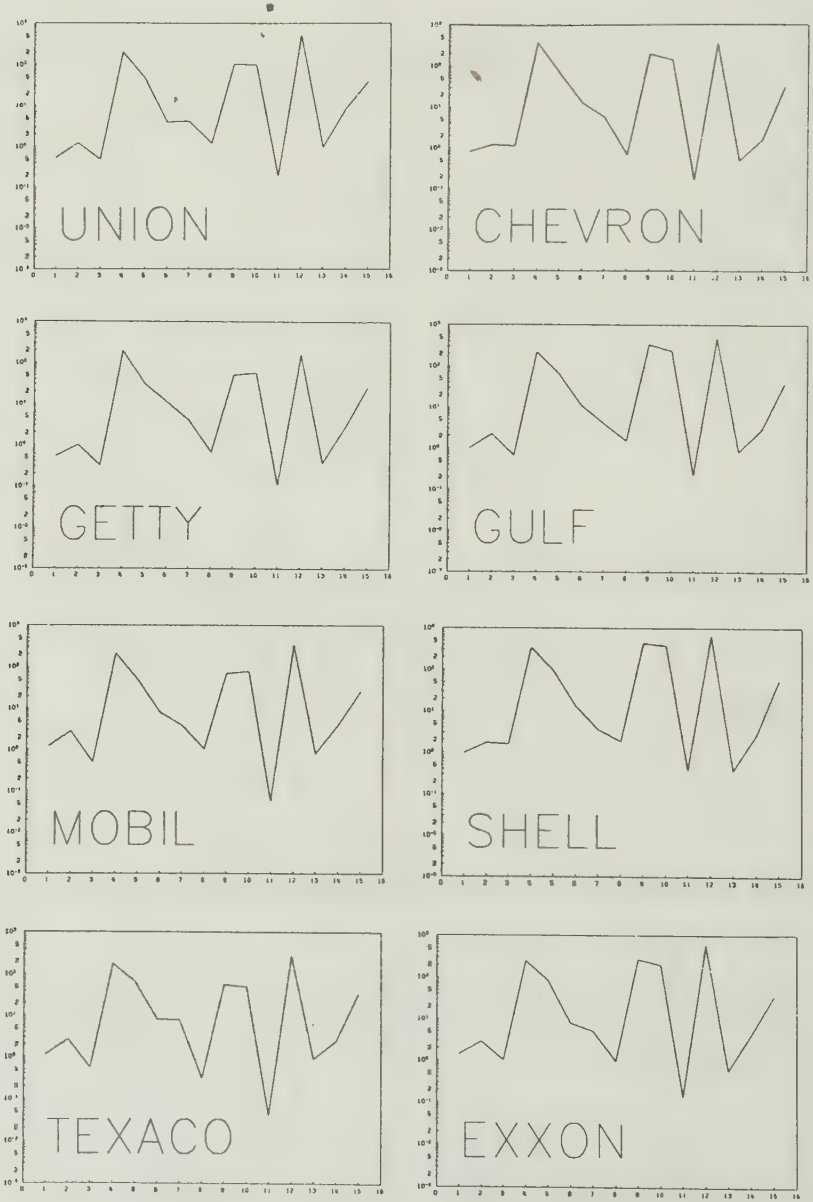


Abb. 12: Lineare Datenprofile (logarithmischer Maßstab).

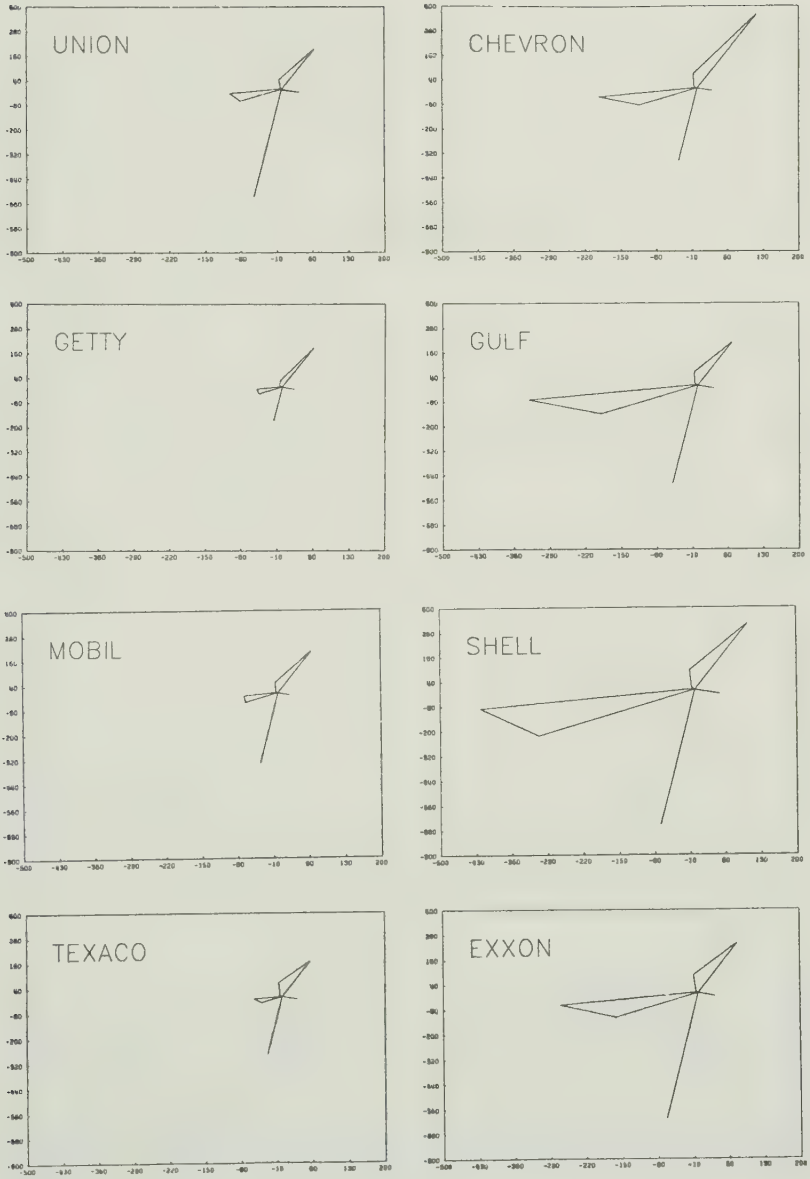


Abb. 13: Zirkuläre Datenprofile (linearer Maßstab).

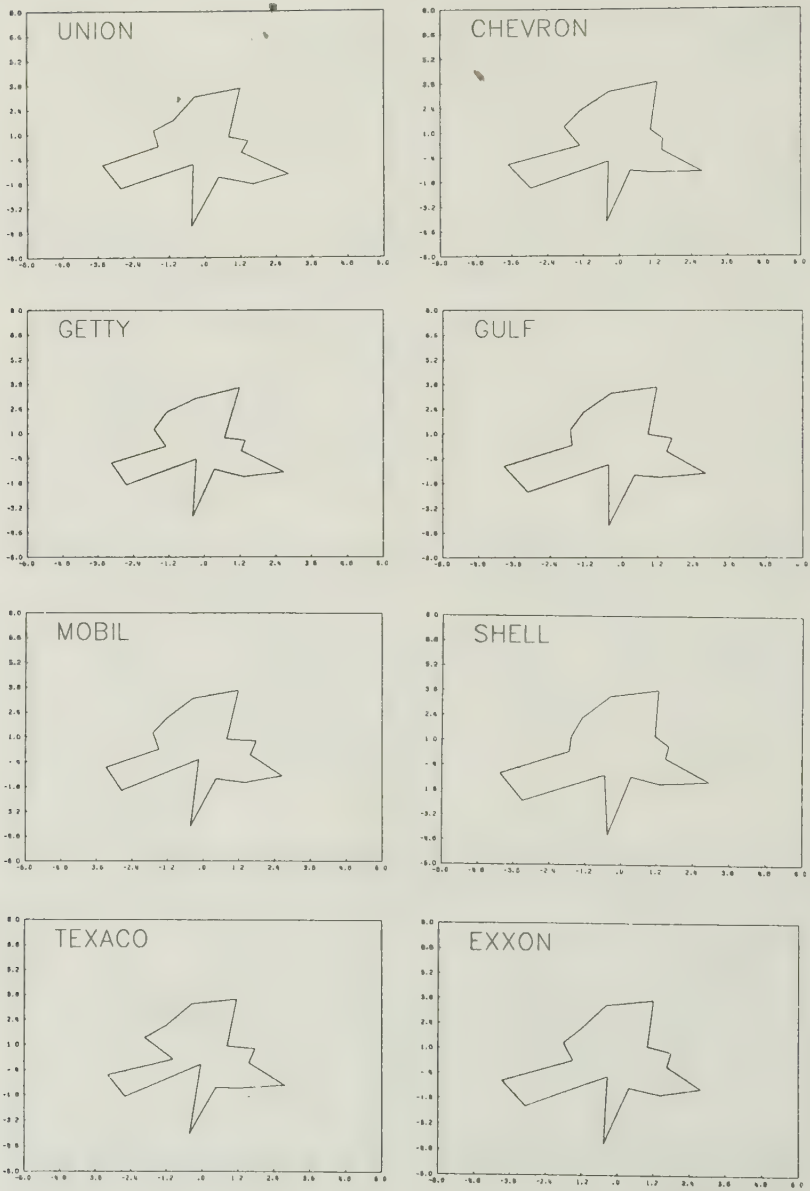


Abb. 14: Zirkuläre Datenprofile (logarithmischer Maßstab).

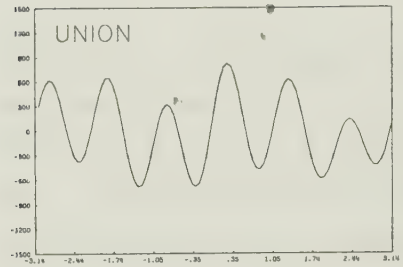
Bekanntlich lassen sich Funktionen einer Variablen leicht in zwei Dimensionen als Graphen darstellen. Die Parameter einer glatten Funktion können daher als Träger diskreter Daten benützt werden. Voraussetzung für die sinnvolle Anwendung ist, daß die Funktion einfach gebaut (periodisch) ist. Damit lassen sich, ebenso wie bei den oben diskutierten Datenprofilen, alle Daten ohne Informationsverlust darstellen.

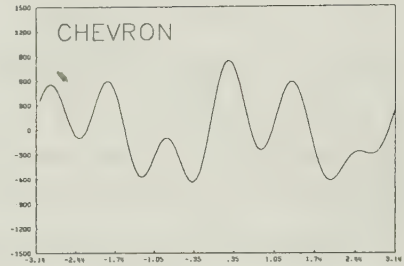
ANDREW (1972) benutzt zur Darstellung multidimensionaler Punkte trigonometrische Funktionen, wobei der multidimensionale Punkt P(X1,X2,...,Xk) durch die Funktion F(t) dargestellt wird. Die Darstellung erfolgt im Intervall (-3.14, 3.14), (vergl. WANG, 1978)

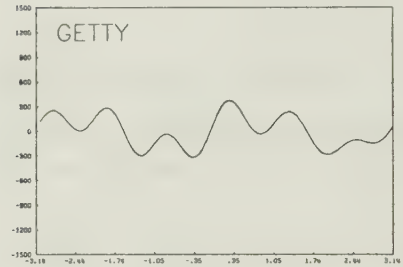
$$F(t) = 1/2 * X1 + X2 * \sin(t) + X3 * \cos(t) + X4 * \sin(2t) + X5 * \cos(2t) + \ldots + Xk * \cos((k-1)t/2) \quad (13)$$

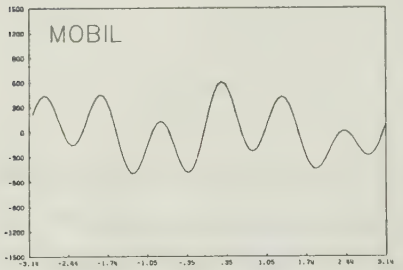
Im Raum benachbarte Punkte ergeben auch benachbarte Kurven, wobei ähnliche Kurven Cluster bilden. Das Ergebnis für die Ölgesellschaften zeigt Bild 15. Auch diese Darstellung ist schwer interpretierbar, doch gelingt es u.U. rascher, die Firma Shell als herausragend zu erkennen.

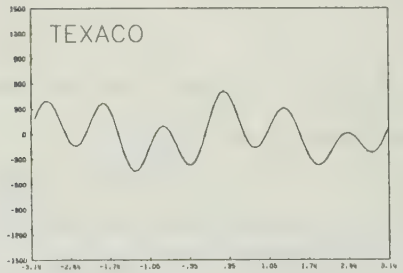
Diese Funktion entspricht einer Fourier-Reihe, wobei die einzelnen Koordinaten Xn des multidimensionalen Punktes P die Fourier-Koeffizienten darstellen. ANDREW's "Sinuskurven" werden daher auch als lineare Fourier Darstellung bezeichnet. Ähnlich wie bei dem linearen Datenprofil, kann auch hier ein Polar-Diagramm erstellt werden. Es entsteht das Polar-Fourier-Diagramm (keine Abbildung).











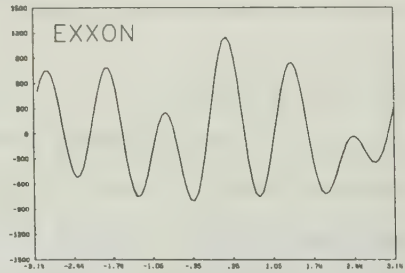


Abb. 15: ANDREW's Sinuskurven (lineare Fourier-Darstellung)

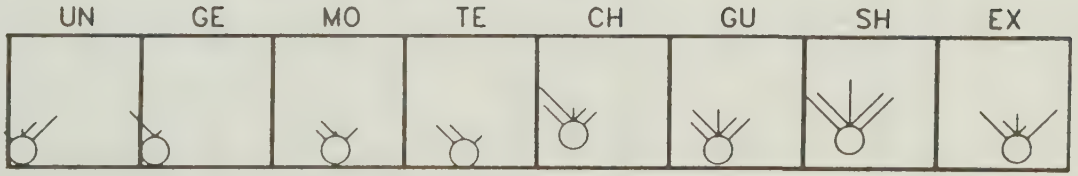
CHERNOFF (1973) empfielt generell die Darstellung in Polardiagrammen, da Kreissegmente besser memorierbar sind als Abschnitte auf linearen Achsen.

Ein weiteres Beispiel einer multivariablen, bildlichen Anzeige sind die sogenannten Metroglyphen von H.T. DAVIS (vergl. WANG, 1978). Bild 16 zeigt die ersten sieben Parameter der Ölgesellschaften aus Tab. 2, dargestellt mit Hilfe dieser Glyphen. Diese bildliche Darstellung ist äußerst ungewohnt und daher schwer lern- und interpretierbar. Die Anwendung ist bisher entsprechend gering.

In neuerer Zeit wird in zunehmendem Maße zur Darstellung hochdimensionaler Daten das sog. CHERNOFF-Face verwandt (WANG und LAKE, 1978; McDONALD und AYERS, 1978; HUFF und BLACK, 1978; ABRAMS, 1981; FLURY und RIEDWYL, 1981, 1983; HAHN, MORGAN, LORENSEN, 1983). Jeder multidimensionale Punkt wird dabei als computergezeichnetes, schematisches Gesicht wiedergegeben. CHERNOFF benutzte erstmals 1971 diese 'Strichmännchengesichter' zur Wiedergabe multivariabler Daten. Seine Gesichter hatten ursprünglich achtzehn Dimensionen, welche durch Form, Länge und Lage der charakteristischen Linien des Gesichtes die Parameter darstellten. Ein typisches CHERNOFF-Gesicht zeigt Bild 17. H.T. DAVIS, Jr. modifizierte diese Gesichter, indem er die Nase zu einem Dreieck erweiterte und Ohren ergänzte, wie es Bild 18 zeigt. Die Anzahl der Parameter erhöht sich nun auf 20 (BRUCKNER, 1978; BRUCKNER und MILLS, 1979). Tabelle 4 zeigt die Zuordnung der Parameter zu den einzelnen Gesichtslinien, sowie deren zugelassener Variationsbereiche. Bei nicht verwendeten Parametern werden Voreinstellungen eingesetzt, sodaß insgesamt ein vollständiges Gesicht berechnet und dargestellt werden kann. Die

Abb. 16: Metroglyphen von DAVIS
Dargestellt sind die ersten sieben Parameter der Tab. 2a.

UN	UNION	CH	CHEVRON
GE	GETTY	GU	GULF
MO	MOBIL	SH	SHELL
TE	TEXACO	EX	EXXON



(aus BRUCKNER, 1978, 1979)

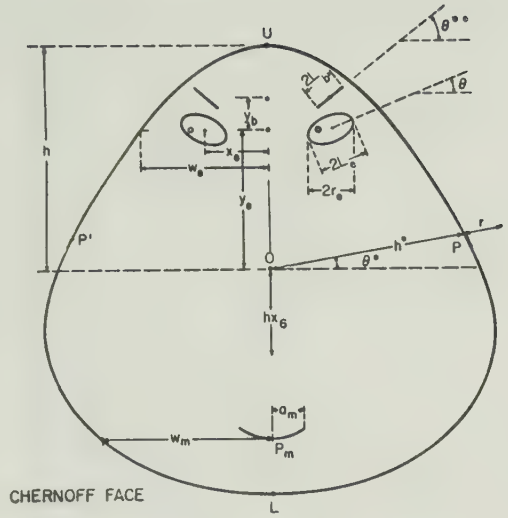


Abb. 17: Original CHERNOFF-Gesicht
(aus BRUCKNER, 1978,1979)

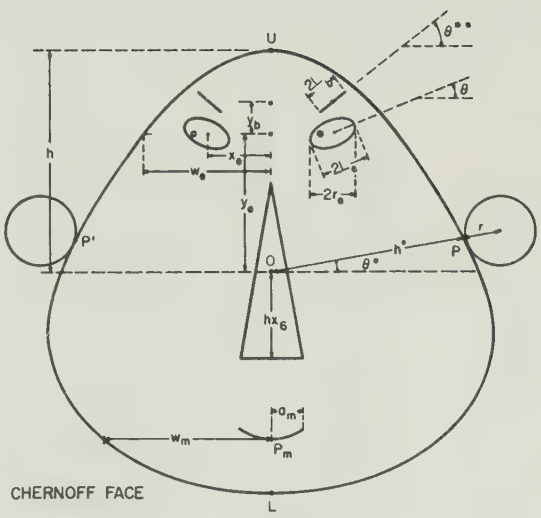


Abb. 18: Von DAVIS modifiziertes
CHERNOFF-Gesicht mit
Nasendreieck und Ohren.
(aus BRUCKNER, 1978, 1979)

Tab. 4: Parameterzuordnung beim DAVIS-CHERNOFF-Gesicht mit Bereichsangaben, (aus BRUCKNER, 1978, 1979)

Variable		Facial Feature	Default Value	Range	
x_1	controls h*	face width	.60	.20	.70
x_2	controls θ*	ear level	.50	.35	.65
x_3	controls h	half-face height	.50	.50	1.00
x_4	is	eccentricity of upper ellipse of face	.50	.50	1.00
x_5	is	eccentricity of lower ellipse of face	1.00	.50	1.00
x_6	controls	length of nose	.25	.15	.40
x_7	controls p_m	position of center of mouth	.50	.20	.40
x_8	controls	curvature of mouth	0.00	4.00	4.00
x_9	controls	length of mouth	.50	.30	1.00
x_{10}	controls y_e	height of center of eyes	.10	0.00	.30
x_{11}	controls x_e	separation of of eyes	.70	.30	.80
x_{12}	controls θ	slant of eyes	.50	.20	.60
x_{13}	is	eccentricity of eyes	.60	.40	.80
x_{14}	controls L_e	half-length of eye	.50	.20	1.00
x_{15}	controls	position of pupils	.50	.20	.80
x_{16}	controls y_b	height of eyebrow	.80	.60	1.00
x_{17}	controls θ** −θ	angle of brow	.50	.00	1.00
x_{18}	controls	length of brow	.50	.30	1.00
x_{19}	controls r	radius of ear	.50	.10	1.00
x_{20}	controls	nose width	.10	.10	.20

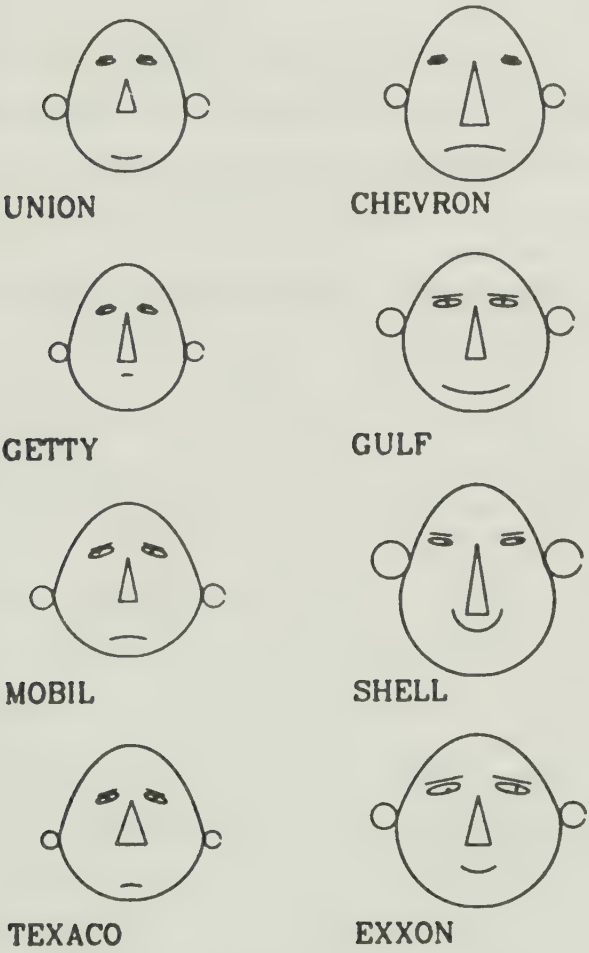


Abb. 19: CHERNOFF-Gesichter der Ölgesellschaften (aus BRUCKNER, 1978, 1979)

Darstellung der zehn Ölgesellschaften mit Hilfe des von DAVIS modifizierten CHERNOFF-Gesichtes zeigt die Abb. 19. Leicht sind die Unterschiede in der Form zu erkennen. Die Firmen Exxon und Shell fallen auf. Interessanterweise haben die CHERNOFF-Gesichter neben der Form eine weitere Wahrnehmungsdimension: den Ausdruck des Gesichtes. Damit wird eine Gesamtbeschreibung des dargestellten multidimensionalen Punktes erreicht. Diese zusätzliche Wahrnehmungsdimension fehlt allen anderen multivariablen Darstellungen völlig. Es liegt daher die Vermutung nahe, daß die Anzeige durch Gesichter gegenüber herkömmlichen multivariablen Displays generell vorteilhafter ist.

2.5 Ergonomische Untersuchungen

Der Mensch sieht und beurteilt ständig die Gesichter seiner Mitmenschen. Diese Aufgabe wird seit frühester Jugend geübt und mit fortschreitendem Alter immer besser beherrscht. Man kann daher erwarten, daß ein menschlicher Beobachter graphisch repräsentierte Daten in Form von Gesichtern besser verarbeiten kann als andersartig dargestellte Daten.

Es sprechen in der Tat einige Gründe für die Vermutung, daß spezielle, visuelle Erkennungsprozesse für Gesichter existieren (YIN, 1970). Psychologische Vergleichsuntersuchungen wurden durchgeführt, um diese Vermutung zu testen (JACOB, EGETH und BEVAN, 1976 sowie JACOB, 1978). Neben den CHERNOFF-Gesichtern wurden dabei rein digitale Tabellen, Polygone (vergl. SIEGEL, GOLDWYN und FRIEDMAN, 1971), die Glyphen von ANDERSON (1960), die den Metroglyphen von DAVIS recht ähnlich sind, sowie um 180 Grad gedrehte (verkehrt herum dargestellte) CHERNOFF-Gesichter den Versuchspersonen angeboten (siehe Bild 20). Die angezeigten Daten waren - wie in derartigen Versuchen üblich - normalverteilte Zufallszahlen.

Das Ergebnis der Untersuchung (JACOB, 1978) zeigt, daß die menschlichen Versuchspersonen im Umgang mit multivariablen Daten signifikant erfolgreicher sind, wenn die Daten in Form richtig herum orientierter Gesichter vorliegen.

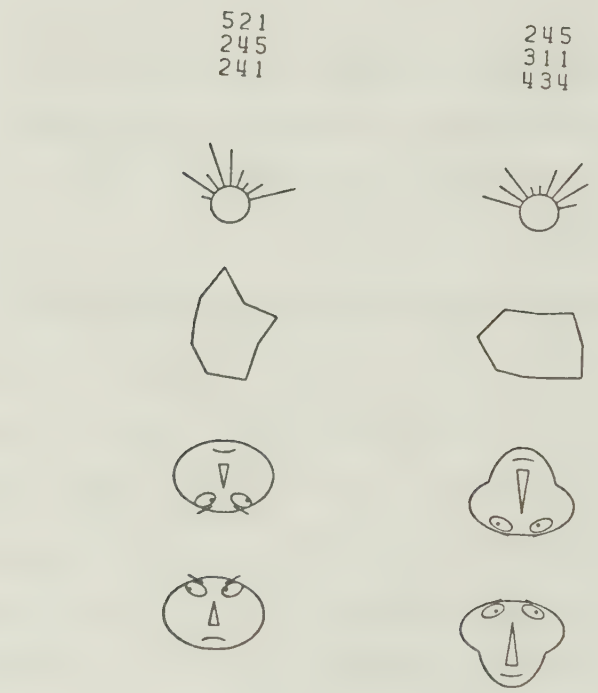


Abb. 20: Verschiedene multivariable Anzeigen bei psychologischen Versuchen. (aus JACOB, 1978)

Interessanterweise erwiesen sich die gedrehten Gesichter ebenso unterlegen, obwohl sie alle für ein Gesicht wesentlichen Merkmale aufweisen. Ihnen fehlt jedoch die gewohnte (normale) Orientierung. Dies bestätigt die These von YIN. Nach ihm tragen die einzelnen Elemente des Gesichtes zu einer Gesamtwirkung bei, so daß Gesichter nicht nur eine "nette" Anordnung geometrischer Linien darstellen, sondern durch ihre Gestalt Träger und Ausdruck von Bedeutung sind.

Es gibt eine Reihe von Untersuchungen (z.B. SECORD, DUKES und BEVAN, 1954; HARRISON, 1964), die zeigen, daß Gesichtsausdrücke mit großer Konstanz holistisch klassifiziert werden. Ein bedeutungsvolles Gesicht ist dabei in jedem Falle ein natürlich wirkendes Gesicht. Diese wichtige Bedingung wird jedoch in vielen Fällen von den CHERNOFF-Gesichtern durch ungünstige Parameterkonstellationen nicht erfüllt (siehe CHERNOFF, 1973). So wurde von JACOB (1976) der Variationsbereich einiger Parameter des CHERNOFF-Gesichtes um 25 % verkleinert und die Berechnung der Umrißlinien des Gesichtes modifiziert, mit dem Ziel deren Natürlichkeit zu steigern und Anomalien und Diskontinuitäten bei kleinen Parametervariationen zu verhindern. Diese Anpassungen erwiesen sich von großer Bedeutung, da menschliche Beobachter in natürlichen Gesichtern bereits äußerst geringfügige Veränderungen wahrnehmen können.

Um die ergonomischen Vorteile bei der Analyse multivariabler Daten durch die Verwendung von Gesichtern besser nutzen zu können, stellt sich die Forderung, die verwendeten Gesichter in Form und Ausdruck "menschlicher" zu gestalten, als dies bei den stark schematischen CHERNOFF-Gesichtern (vergl.

Bild 17 - 18) der Fall ist. Die parametrische Variation der Gesichter sollte dabei emotionale, mimische Reaktionen widerspiegeln, damit die Gesichtsausdrücke nicht zufällig und unnatürlich, sondern bedeutungsvoll und gut klassifizierbar werden. Emotionale Mimik weist eine ethnographische Universalität auf (DARWIN, 1872 ; EIBL-EIBESFELDT, 1984; EKMAN und FRIESEN, 1971; EKMAN, 1972, 1973; IZARD, 1971) und ist daher prinzipiell geeignet.

Diese Darstellungsart stellt einen Schritt in Richtung der sich selbst erklärenden Graphik dar, da sie Elemente der menschlichen Alltagserfahrung integriert. Computer-Graphik dieser Art ist für den menschlichen Benutzer maßgeschneidert.

2.6 Bedeutungsvolle Reaktorzustandsdisplays

Die Zustandsebene des diskutierten Reaktormodells (vergl. Abschnitt 2.1) läßt sich in Gebiete mit verschiedener prognostischer Bedeutung unterteilen (siehe Abb. 21). Hierzu müssen zunächst Bedingungen angegeben werden, die eine Zustandsidentifikation erlauben. Als besonders wichtig erscheint das Gebiet des kritischen Reaktorzustandes mit einem durch Selbstbeschleunigung charakterisierten Reaktionsverhalten. Eine Diagnose dieses Zustandes erlauben die Bedingungen.

Temperaturzunahme: $dX2 / dtau > 0$

Beschleunigte Reaktion: $d^2X2 / dX1^2 > 0$

In ähnlicher Weise kann man anderen Gebieten der Zustandsebene Bedingungen zuordnen, welche durch eine mimische Dimension repräsentiert werden können. Tabelle 5 zeigt eine Zusammenstellung aller Bedingungen zur automatischen Identifikation der Reaktorzustände. Den einzelnen Bereichen der Zustandsebene, wie sie die Abb. 21 zeigt, kann in einem folgenden Schritt jeweils ein bedeutungsvoller, mimischer Ausdruck zugeordnet werden, wodurch eine eindeutige Identifikation des Gebietes möglich wird. Die Zuordnung der Bereiche der Reaktorzustandsebene zu den emotionalen, mimischen Ausdrücken muß dabei mit besonderer Sorgfalt erfolgen, da ein Rückschluß auf den Reaktorzustand vom Benutzer aus der Bedeutung des Ausdrucks möglich sein soll. Es ist beispielsweise nicht sinnvoll, gefährliche Reaktorzustände durch eine lächelnde Freude-Mimik zu signalisieren, da hierbei keinerlei

Bedrohlichkeit zum Ausdruck gebracht wird. Tab. 6 zeigt den Zusammenhang zwischen den einzelnen Zustandsbereichen und emotionalen, mimischen Ausdrücken. Die Abb. 22 lokalisiert diese emotionalen Bereiche in der Zustandsebene des chemischen Reaktors.

Tabelle 5: Bedingungen zur Identifikation bedeutungsvoller Areale der Zustandsebene des chemischen Reaktors

Bedeutung	Bedingung
Reaktionsbeginn	$\left(\frac{dX2}{dX1} > 0 \right)$ AND $(X2 < X2min)$
Höhepunkt der Reaktion	$\left(\frac{dX2}{dX1} = 0 \right)$
abklingende Reaktion	$\left(\frac{dX2}{dX1} < 0 \right)$
Heftige Reaktion	$\left(\frac{dX2}{dX1} > 0 \right)$ AND $\left(\frac{d^2 X2}{dX1^2} <= 0 \right)$
Kritischer Bereich	$\left(\frac{dX2}{dX1} > 0 \right)$ AND $\left(\frac{d^2 X2}{dX1^2} >= 0 \right)$
Reaktionsende	$\left(\frac{dX2}{dX1} < 0 \right)$ AND $\left(\frac{d^2 X2}{dX1^2} > 0 \right)$

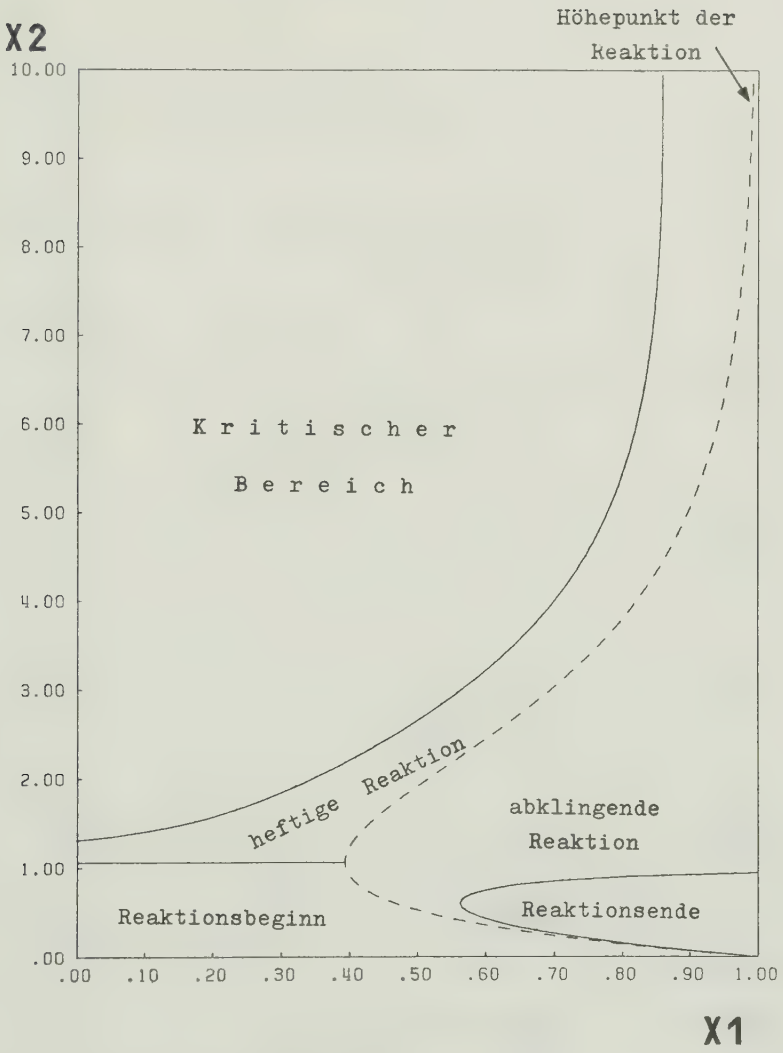


Abb. 21: Zustandsebene des Reaktors mit Bedeutungszuordnungen.

Tab. 6: Zuordnung der Reaktorzustandsbereiche zu mimischen Ausdrücken.

Zustandsbereich	Bemerkung/Interpretation	Ausdruck
Reaktionsbeginn	Temperatur und Produktkonzentration gering Geringer Reaktionsfortschritt	Trauer
Heftige Reaktion	Temperatur steigend. Noch unkritischer Verlauf Nahe am kritischen Bereich	Furcht
abklingende Reaktion	Temperatur schnell sinkend Reaktion nahezu beendet	Freude
Reaktionsende	Temperatur langsam sinkend Reaktor kühlt ab Reaktion beendet	Lachen
Höhepunkt der Reaktion	Überschreiten des Temperaturmaximums Umschlagen des Reaktionsverhaltens	Überraschung
Kritischer Bereich	Selbstbeschleunigte Reaktion Temperatur schnell steigend Es droht Gefahr von Seiten des Reaktors !	Wut

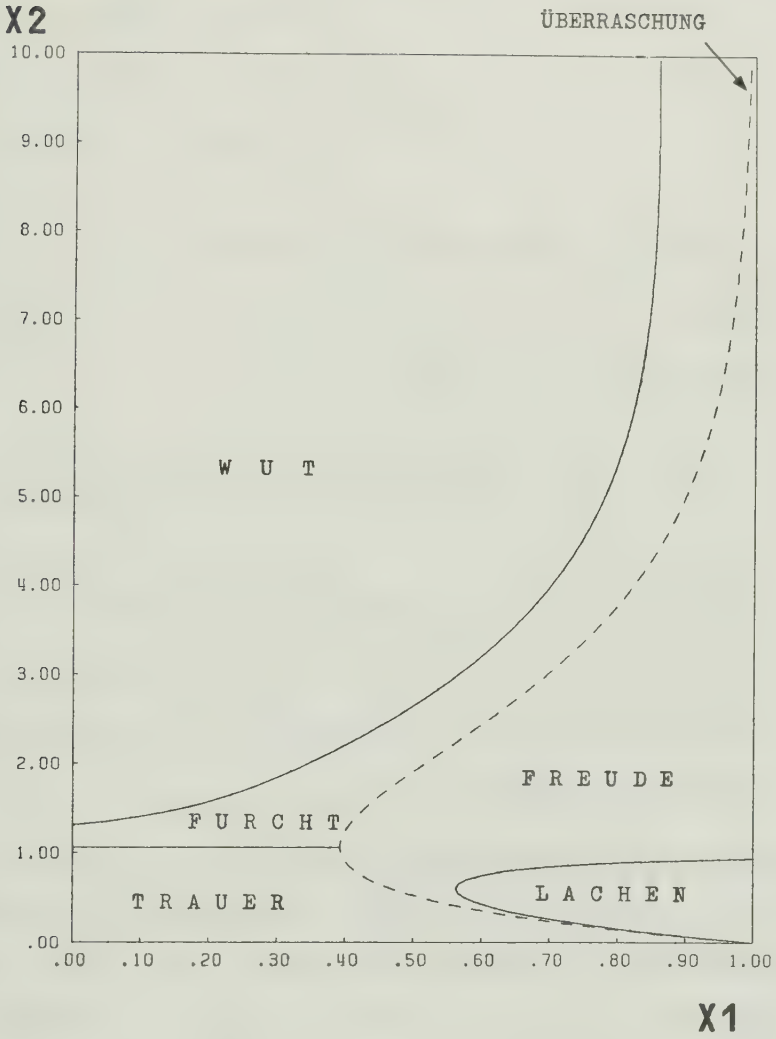


Abb. 22: Zustandsebene des Reaktors mit mimischer Bedeutungszuordnung.

Der Verlauf einer chemischen Reaktion wird durch die Bahn einer Trajektorie in der Zustandsebene des Reaktors beschrieben. Sie durchläuft dabei verschiedene Gebiete, welche nun durch unterschiedliche mimische Ausdrücke angezeigt werden. Innerhalb eines Gebietes unterliegt der mimische Ausdruck einer Intensitätsmodulation, so daß der Display-Benutzer nach Kenntnis der Intensitätsprofile aufgrund des Ausdrucks den Reaktorzustand ablesen kann. Aus der Dynamik des mimischen Bildes läßt sich außerdem auf die Dynamik des Reaktors schließen. Die Bilder 23 - 28 zeigen die verwerwendeten Intensitätsprofile für die einzelnen Bereiche der Zustandsebene des diskutierten Reaktormodells in gerasterter Form.

Die Intensitätsmodulation der einzelnen Gebiete und damit die Dynamik der angezeigten Mimik ist auf den zeitlichen Verlauf der Trajektorie in der Zustandsebene abgestimmt. An den Gebietsgrenzen stoßen die einzelnen Emotionen in der Regel mit verschwindender Intensität aneinander. Lediglich der wichtige Übergang vom optimalen, aber empfindlichen Reaktionsverlauf zum kritischen Reaktorverhalten wird durch einen abrupten Anzeigewechsel dargestellt. Das Abklingen der Reaktor-Temperatur wird ähnlich, jedoch weniger dramatisch dargestellt.

Als bedeutungsvolle, mimische Ausdrücke können die Grundemotionen (vergl. HJORTSJö, 1969; IZARD, 1971; EKMAN, FRIESEN und ELLSWORTH, 1972; EKMAN, 1973; EKMAN und FRIESEN, 1975; PLUTCHIK, 1980) verwendet werden: Trauer, Furcht, Überraschung, Wut, Ekel und Freude. Die Bilder 30 - 36 zeigen die Grundemotionen mit unterschiedlicher Intensitätsabstufung. Im vorliegenden

Fall wird das Ekel-Display nicht verwendet, da es mit keinem Reaktorzustand sinnvoll assoziiert werden kann. Der zusätzlich aufgenommene Ausdruck "Lachen" stellt lediglich eine Variation von "Freude" mit erhöhter Intensität dar, die sich hauptsächlich durch den breiteren und weiter geöffneten Mund von reiner "Freude" unterscheidet.

Im Bereich Trauer befindet sich die maximale Intensität am Nullpunkt (keine Reaktion). Sie fällt linear in X1-Richtung bis zur Ortskurve des Temperaturmaximums Tmax ab. In X2-Richtung findet die Trauer-Intensität nach ebenfalls linearem Abfall ihren Nullpunkt bei der Temperatur Tmin, welche den Extremwert der Tmax-Kurve markiert. Die Bilder 23a und 23b zeigen dieses Intensitätsprofil. Abb. 30 zeigt die zugehörigen mimischen Ausdrücke mit der Intensitätsabstufung 0.25, 0.5, 0.75 und 1.0.

Für höhere Temperaturen schließt sich in X2-Richtung der Furcht-Bereich an. Dieser stellt das Gebiet zunehmender Temperatur und beschleunigter Reaktionsgeschwindigkeit bis zum kritischen Bereich hin dar. Das Maximum in diesem Gebiet wird durch die Grenzkurve des kritischen Bereichs gebildet. Von diesem Maximum aus fällt die Intensität sowohl in X1-, als auch in X2-Richtung linear bis zu den Gebietsgrenzen hin ab (vergl. Abb. 24). Abb. 31 zeigt wieder eine Serie von intensitätsgestaffelten mimischen Ausdrücken der Furcht.

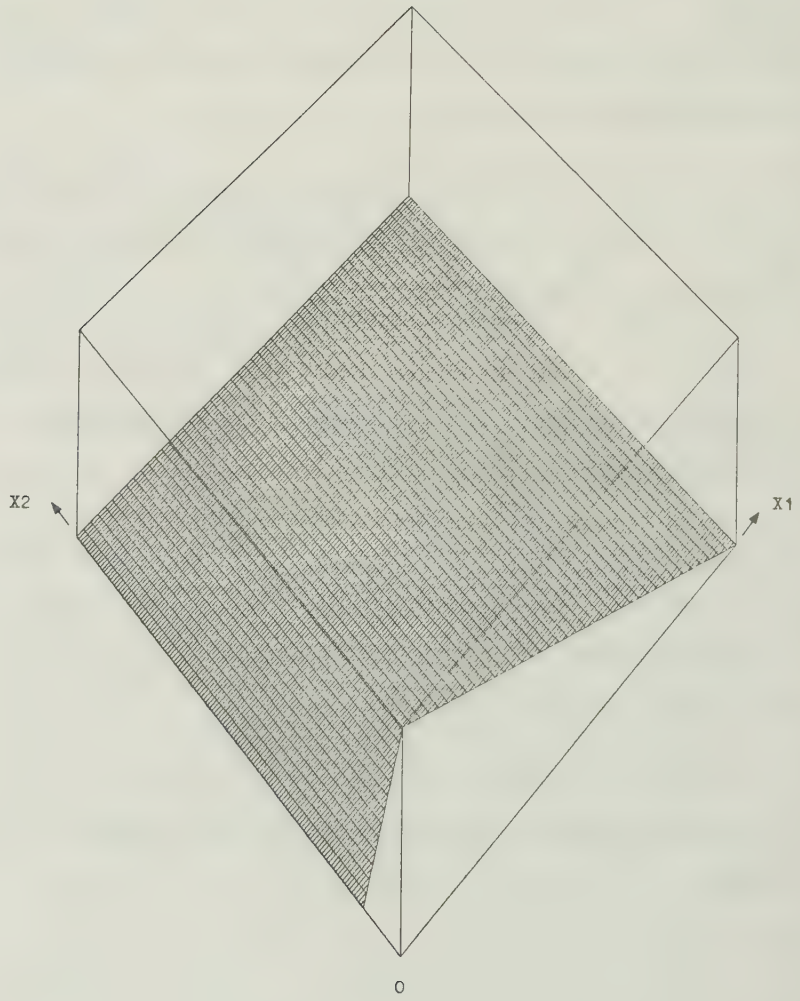


Abb. 23a: Intensitätsprofil des Trauer-Gebietes

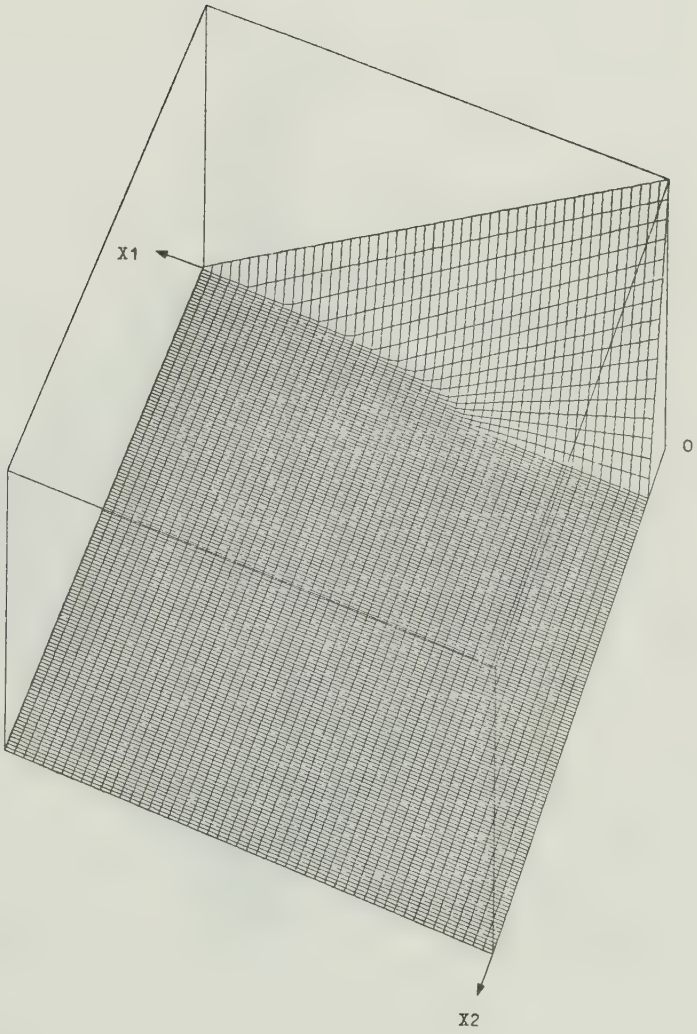


Abb. 23b: Intensitätsprofil des Trauer-Gebietes aus einer anderen Perspektive

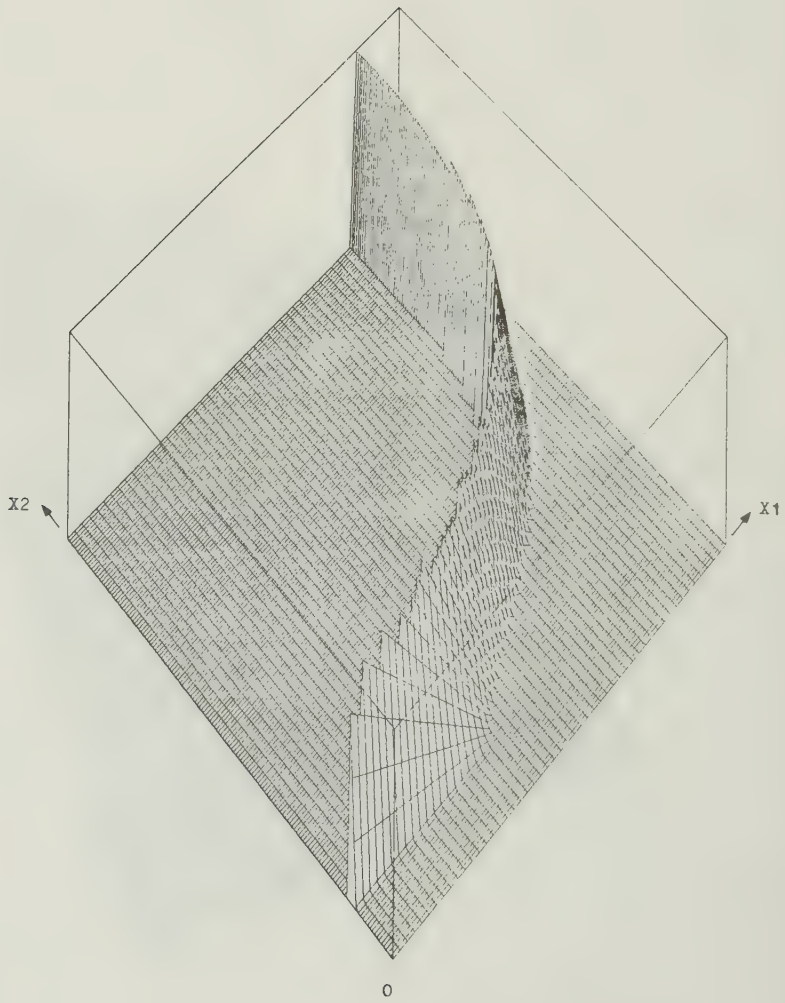


Abb. 24: Intensitätsprofil des Furcht-Gebietes

Aus Sicherheitsgründen sollte im Reaktionsverlauf das Gebiet kritischer Reaktionszustände (vergl. Abb. 8) gemieden werden. Der Eintritt solcher Zustände wird durch eine Wut-Mimik variabler Intensität signalisiert (Bild 33). Um eine rasche Wahrnehmung der bedrohlichen Situation zu gewährleisten, muß dabei die Intensität der Darstellung schnell ansteigen, damit ein geringes Eindringen der Trajektorie in das kritische Gebiet rasch erkannt werden kann. Duch eine Wurzelfunktion im normierten Bereich zwischen 0 und 1 in beiden Achsrichtungen wird ein schneller Intensitätsanstieg in Form einer liegenden Parabel an der Grenze zum Furcht-Bereich erreicht (Bild 25). Die ganze Bedrohlichkeit zeigt sich in der Bildserie von Abb. 32, welche die zunehmende Wut-Mimik zum Ausdruck bringt.

Die Intensität der Freude ist beim absoluten Reaktionsende (Produktkonzentration X1 = 1 und Temperatur X2 = 0) maximal. Sie fällt linear mit X2 ab. In X1-Richtung verschwindet die Freude-Intensität auf der Ortskurve des Temperaturmaximums Tmax. Der Abfall erfolgt linear in beiden Richtungen. Damit wird der gesamte Bereich fallender Temperatur von diesem Ausdruck eingenommen (siehe Bild 26). Das entsprechende Mimik-Display zeigt Abb. 33.

In einem kleinen Bereich, nahe des absoluten Reaktionsendes, wird die Freude-Mimik durch den Ausdruck des Lachens überlagert (vergl. Abb. 27). Das Intensitätsmaximum fällt mit dem Maximum der Freude zusammen. Die Intensitätsvariation ist der Freude-Mimik analog. Sie fällt linear in X1- und X2-Richtung bis zu den Gebietsgrenzen hin ab. Die zugehörige Mimik zeigt Abb. 34.

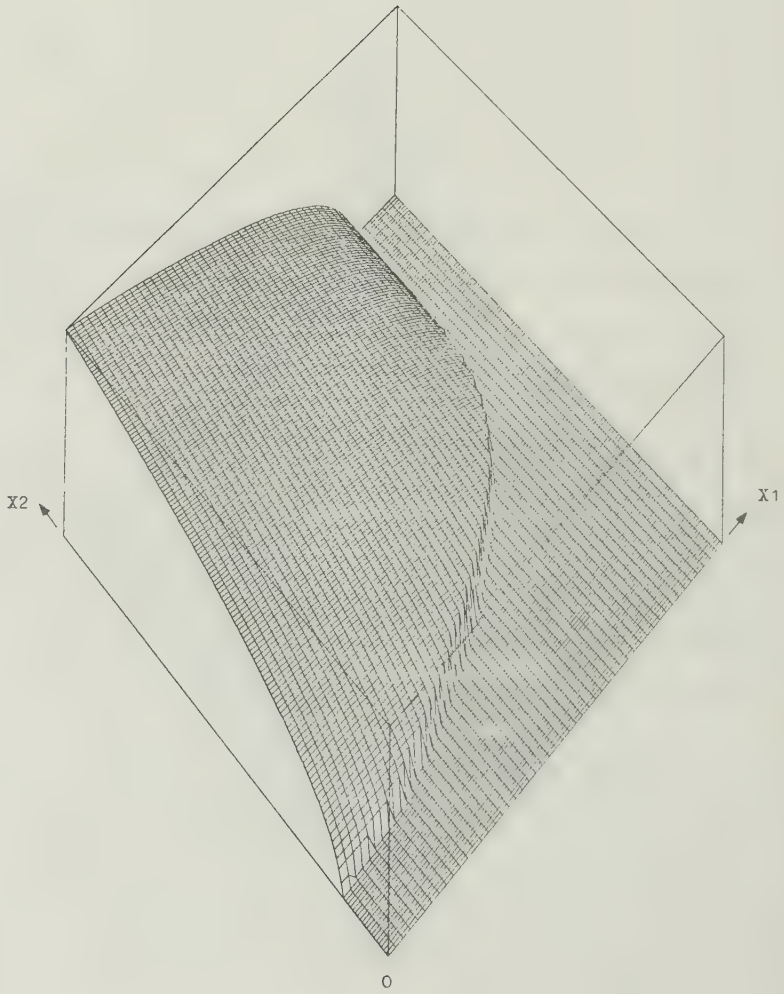


Abb. 25: Intensitätsprofil des Wut-Gebietes

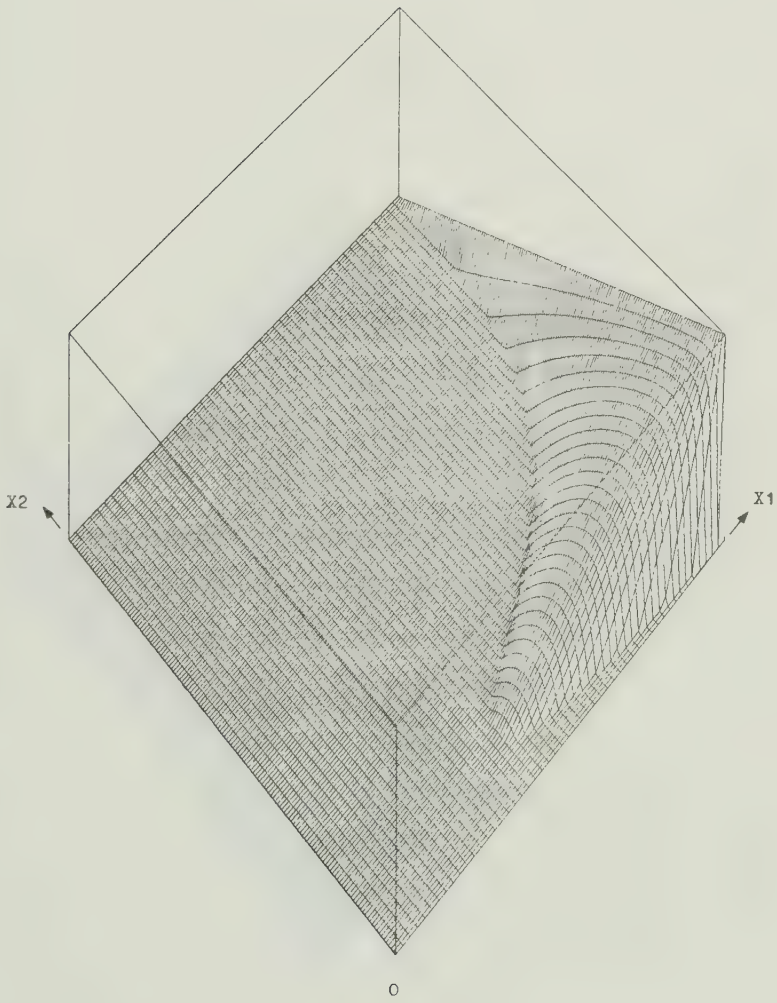


Abb. 26: Intensitätsprofil des Freude-Gebietes

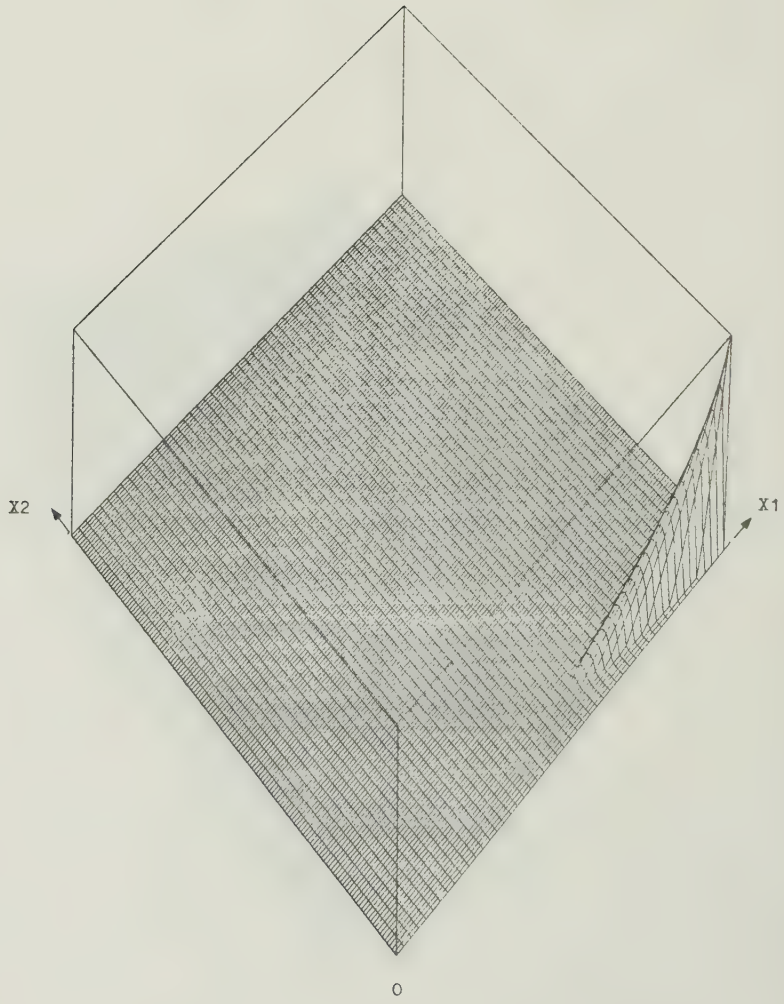


Abb. 27: Intensitätsprofil des Lachen-Gebietes

Das Überraschungsdisplay ist ein ausgedehntes Gebiet, in dem dieser Ausdruck ungestört auftritt, was auch recht unnatürlich wäre, denn: "you can never be surprised for long" (EKMAN und FRIESEN, 1975). In diesem Sinne tritt die Überraschung als Linearkombination mit anderen Mimiken entlang der Tmax-Kurve beim Übergang von Furcht zur Freude, bzw. Lachen auf. Ein zu erwartender typischer Verlauf zeigt beispielsweise bei wachsender Überraschung abnehmende Furcht. Nach dem Verschwinden der Furcht beginnt die Freude zuzunehmen, verbunden mit einem Sinken der Überraschungsintensität. Die Intensität der Überraschung ist dabei dem Temperaturwert X2 proportional (vergl. Bild 28). Die Überraschung wird somit (bis auf die Ortskurve Tmax) durch die Umgebung geprägt, ganz in Übereinstimmung mit natürlichen mimischen Verhalten des Menschen. Ein reines Überraschungsdisplay zeigt Abb. 35 mit der bekannten Abstufung in der Intensität.

Sollte aufgrund fehlerhafter Datenübertragung von der Meßstrecke keine Identifizierung eines Zustandsbereiches möglich sein, so wird automatisch ein Ekel-Ausdruck maximaler Intensität angezeigt. Das Bild dieses Ausdrucks zeigt das 4. Teilbild der Abb. 36.

Das Bild 29 zeigt zusammenfassend die gesamte Zustandsebene mit allen Intensitätsprofilen. Lachen ist dabei durch das Profil der Freude verdeckt. Für sämtliche zur Anzeige gebrachten mimischen Ausdrücke bewegt sich die Intensität im Intervall zwischen 0 und 1, was dem Standard-Gesicht (Intensität 0) bzw. dem mimischen Ausdruck maximaler Intensität entspricht.

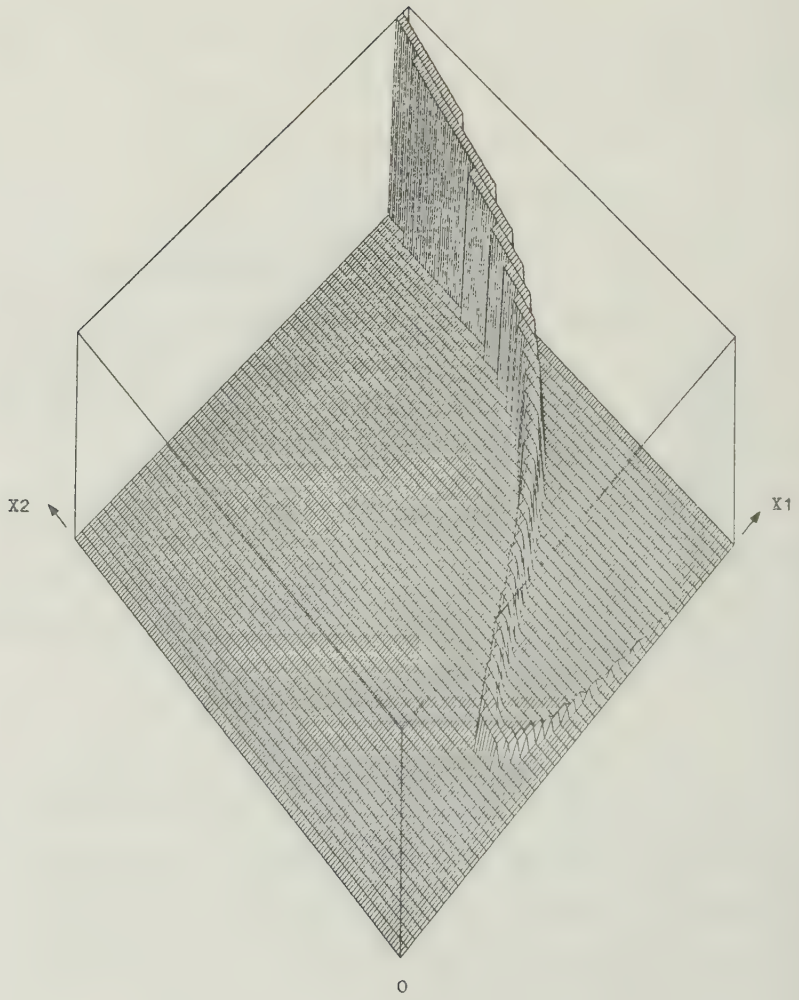


Abb. 28: Intensitätsprofil des Überraschung-Gebietes

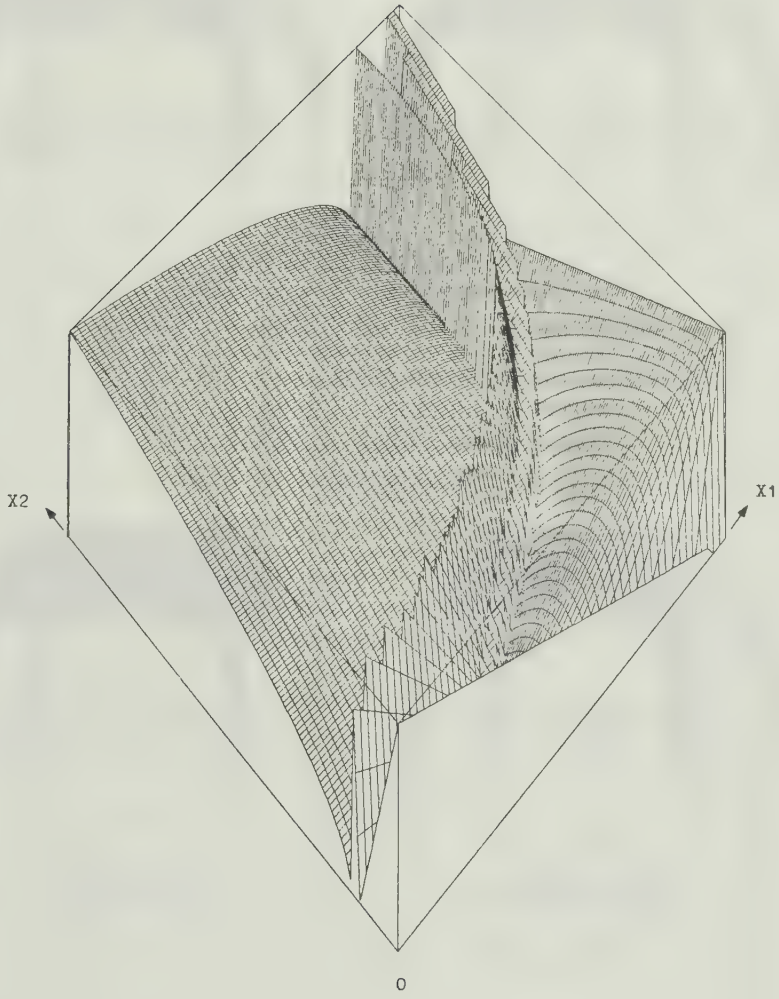


Abb. 29: Gesamtdarstellung aller Intensitätsprofile (außer Lachen)

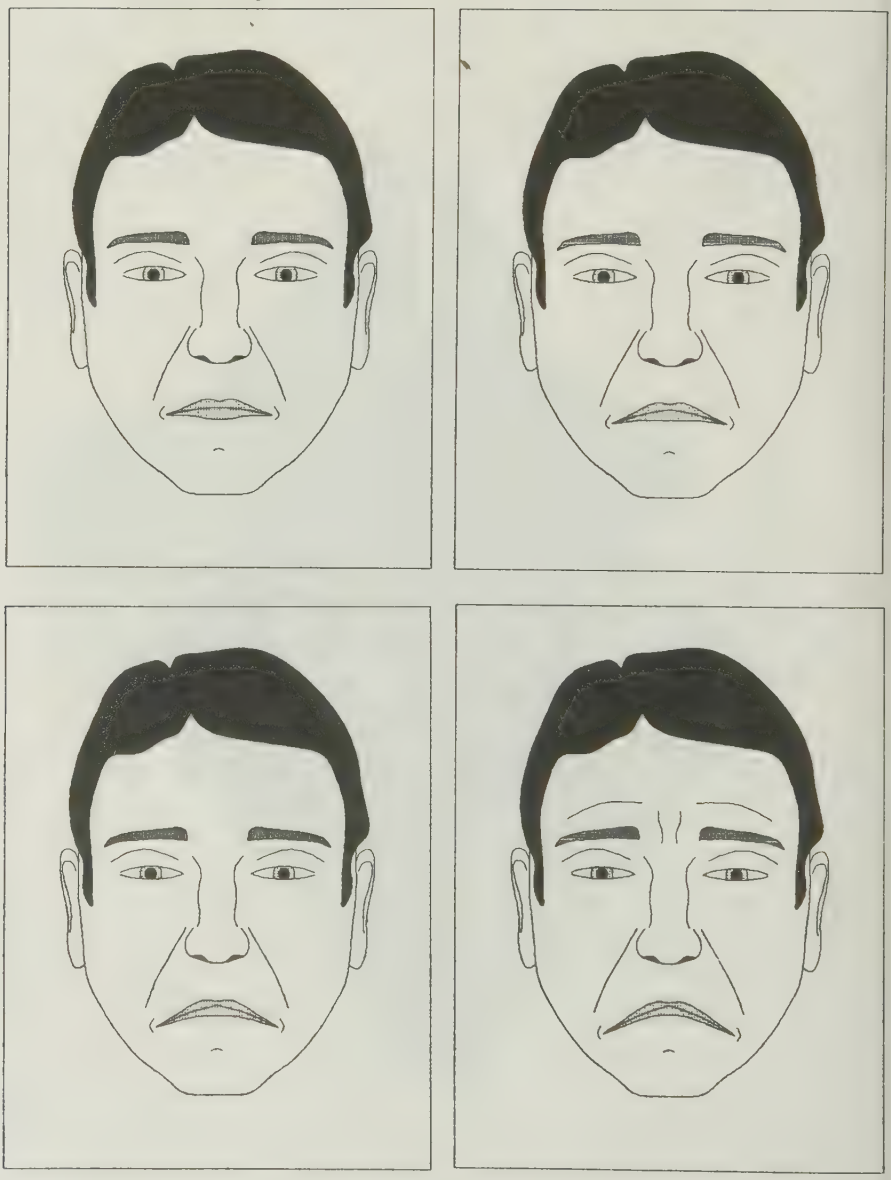


Abb. 30: Trauer-Gesicht mit den Intensitäten: 0.25; 0.50; 0.75 und 1.0

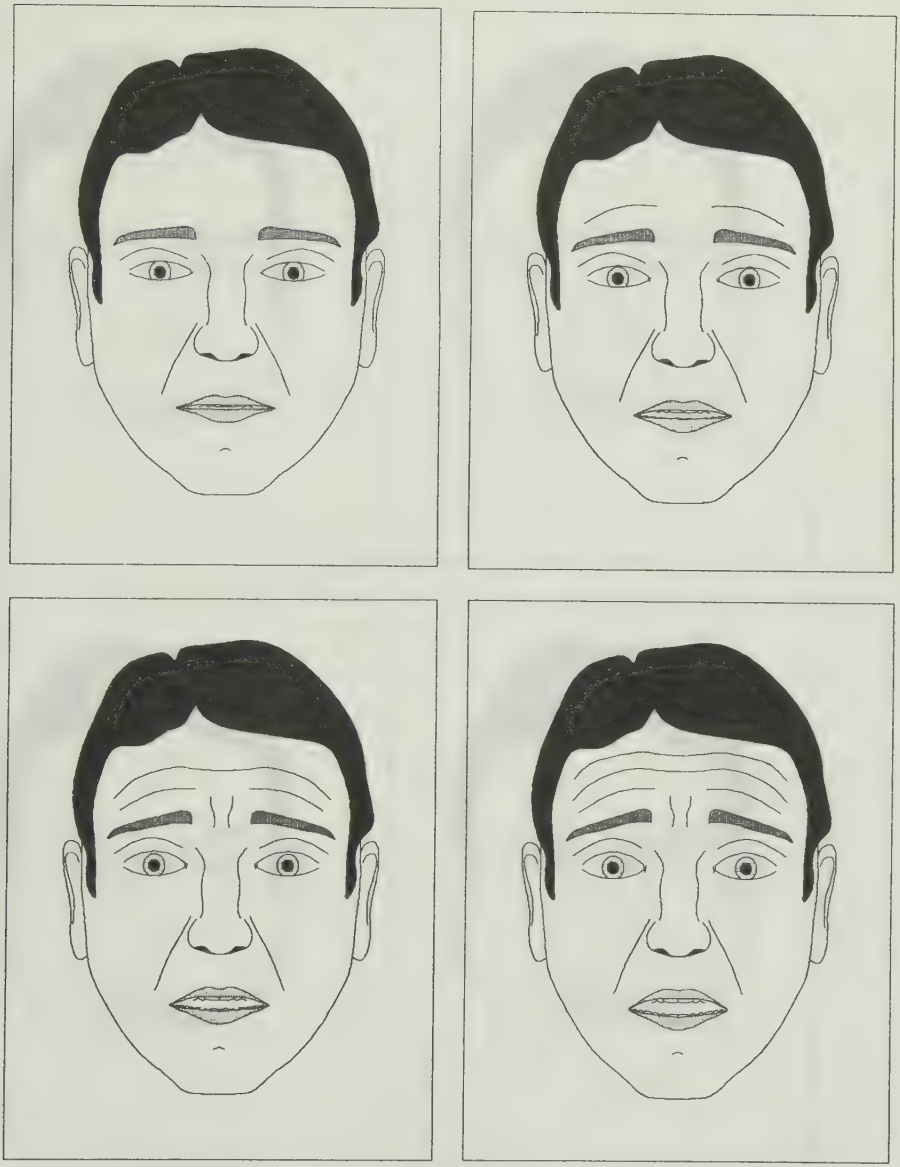


Abb. 31: Furcht-Gesicht mit den Intensitäten: 0.25; 0.50; 0.75 und 1.0

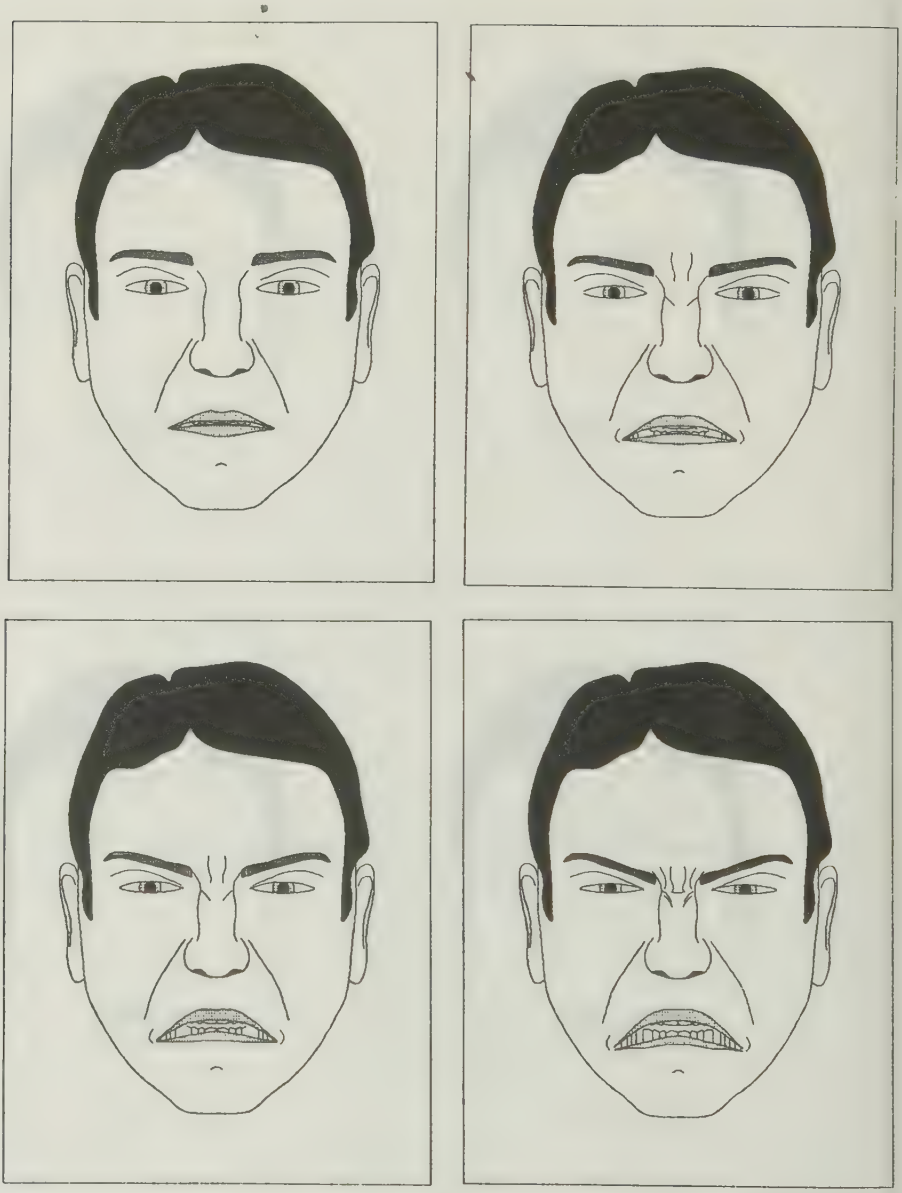


Abb. 32: Wut-Gesicht mit den Intensitäten: 0.25; 0.50; 0.75 und 1.0

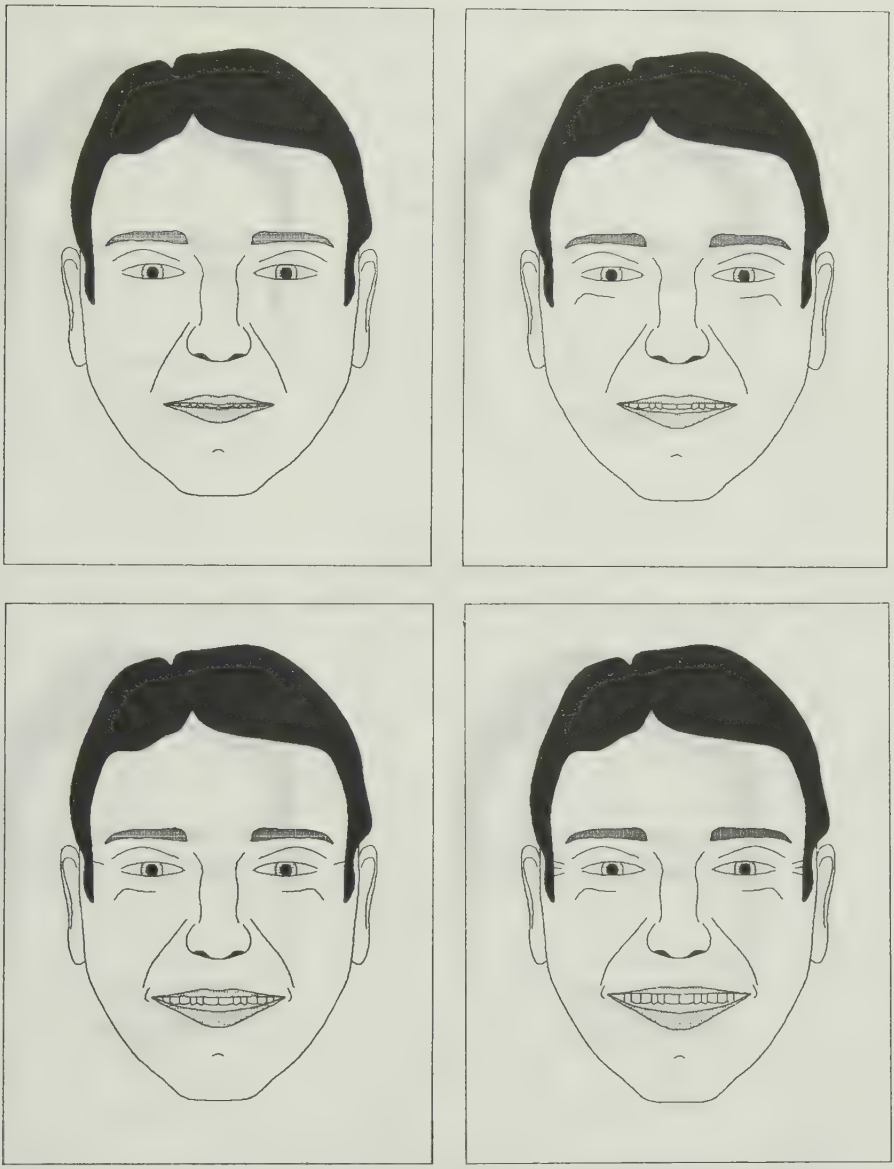


Abb. 33: Freude-Gesicht mit den Intensitäten: 0.25; 0.50; 0.75 und 1.0

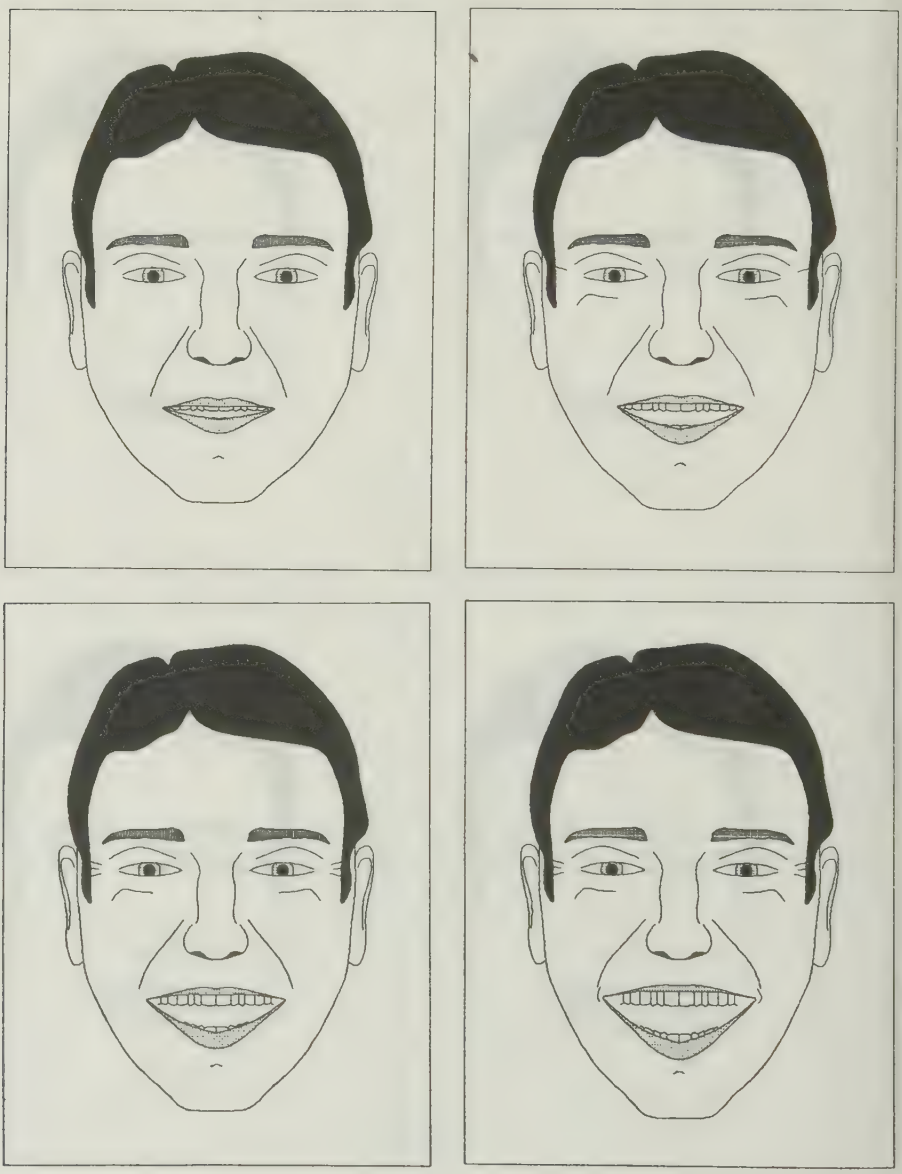


Abb. 34: Lachen-Gesicht mit den Intensitäten: 0.25; 0.50; 0.75 und 1.0

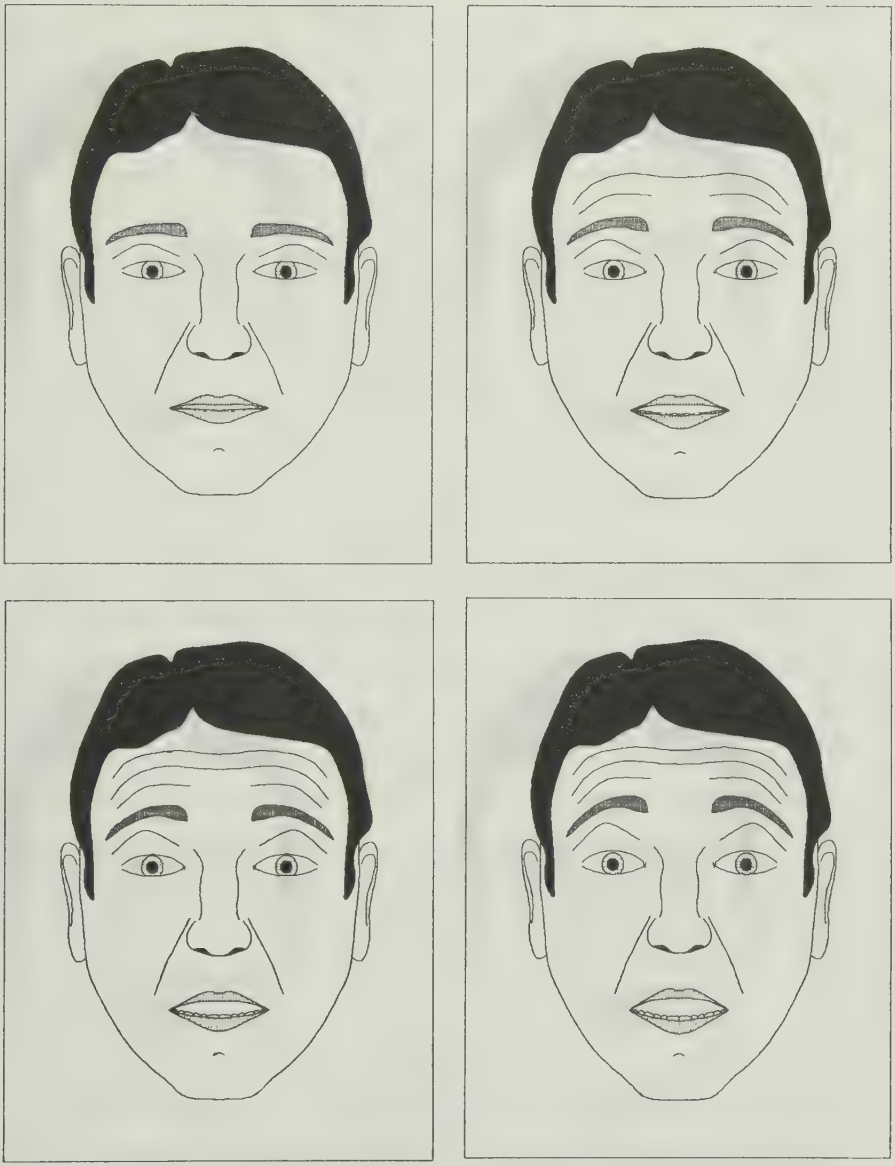


Abb. 35: Überraschung-Gesicht mit den Intensitäten: 0.25; 0.50; 0.75 und 1.0

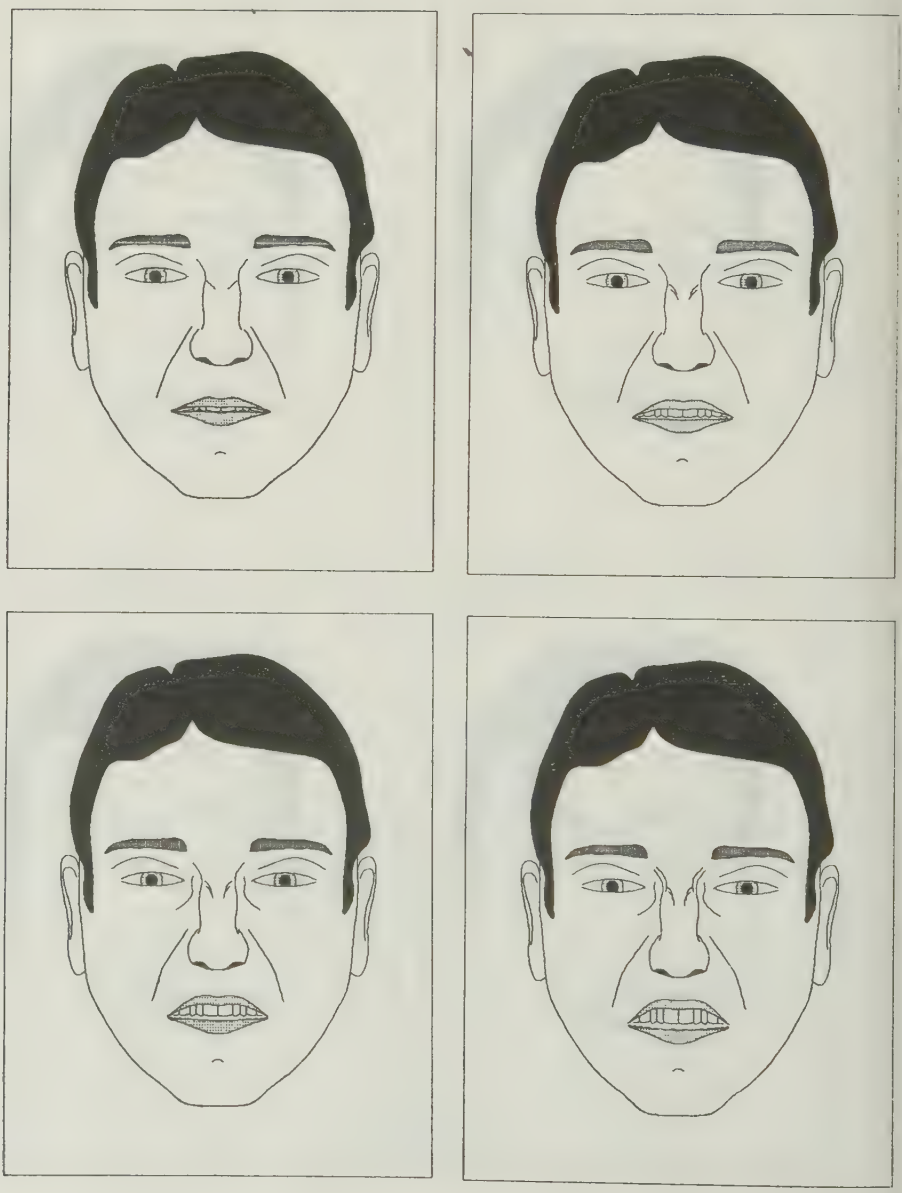


Abb. 36: Ekel-Gesicht mit den Intensitäten: 0.25; 0.50; 0.75 und 1.0

Die einzelnen Gebiete werden im Laufe einer Reaktion nacheinander durchlaufen. Einen unkritischen Reaktionsverlauf mit typischen Parametern zeigt das Bild 37. Die entsprechende Darstellung der Reaktionsdynamik durch Gesichtsmimik ist aus der Bildserie der Abb. 38 ersichtlich. Dieser Serie liegt das Datenfile des Abschnittes 7.3.5 zugrunde. Es stellt einen kleinen Ausschnitt von zwanzig Zustandswerten dar, von insgesamt vierhundertdrei berechneten Punkten in der Zustandsebene. Es wurden jeweils die Werte im Abstand von 0.1 Einheiten der dimensionslosen Zeit Tau notiert, sowie die Übergänge zwischen zwei Bereichen und eventuell dazwischenliegende Maximalwerte. Obwohl die Bildserie der Abb. 38 die filmartige Dynamik des realen Displays nicht aufweist, ist der Wechsel des Ausdrucks im Laufe der Reaktion deutlich erkennbar. Das Bild 39 zeigt im Gegensatz zur Abb. 37 einen leicht kritischen Reaktionsverlauf, deutlich erkennbar durch das Eindringen der Trajektorie in den kritischen Bereich. Dies kommt auch in der zugehörigen Bildserie der Abb. 40 klar zum Ausdruck. Die warnende Furchtmimik des Teilbildes Nr. 7 kündigt die folgende Bedrohung überzeugend intensiv an. Bei der Überschreitung der Grenzkurve des kritischen Bereiches erfolgt ein dramatischer Wechsel zur Wutmimik mit zunächst geringer Intensität, welche sich in den folgenden Teilbildern noch steigert. Das Senken der Brauen und Mundwinkel zeigt die steigende Gefahr. Die Natürlichkeit der filmartigen Darstellung beim realen Display unterstützt die Überwachungsfunktion darüberhinaus erheblich.

Es ist damit ein Anzeigeinstrument geschaffen, das schnell und leicht verständlich den Überblick über ein komplexes, multivariables dynamisches System herstellt. Die Erkennung kritischer Zustände der chemischen Reaktion läßt sich so für einen menschlichen Beobachter zuverlässig realisieren.

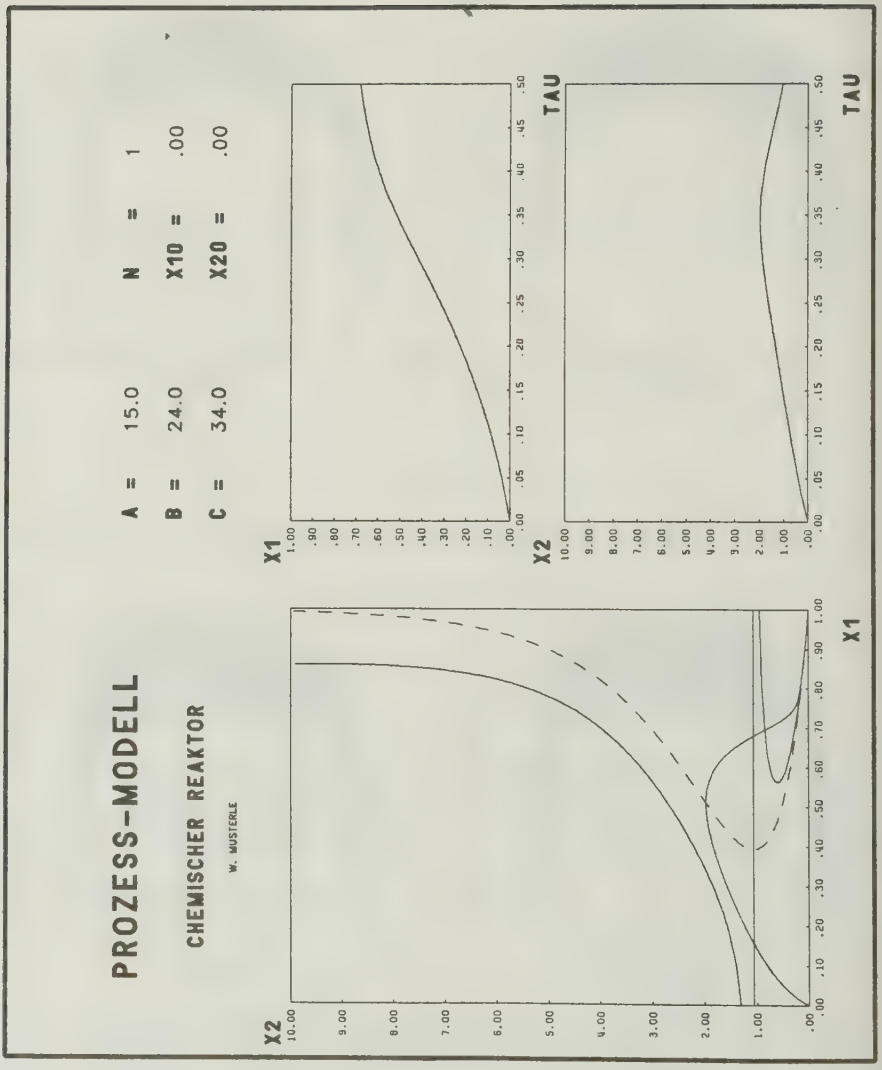


Abb. 37: Typischer Verlauf einer Reaktion: (unkritisch)

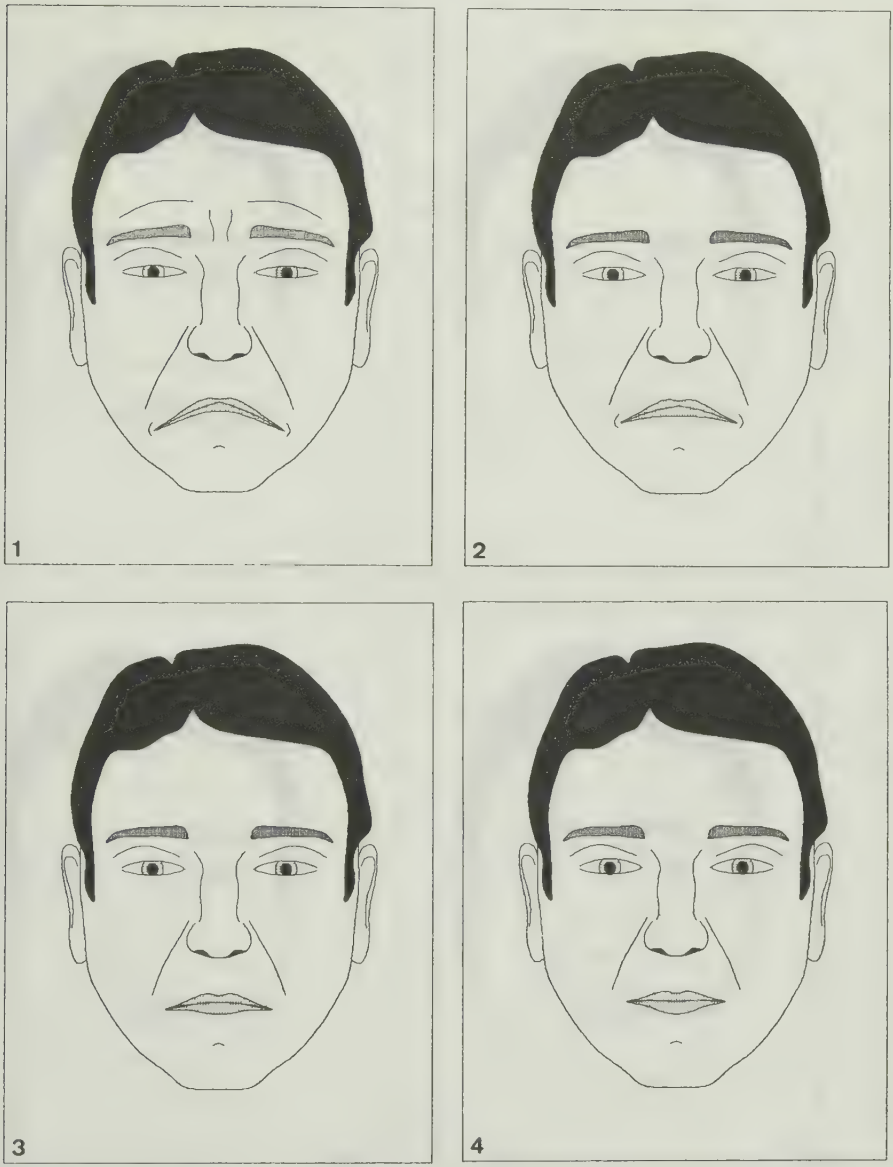


Abb. 38a: Mimik-Sequenz zur Darstellung des Reaktionsverlaufes aus Abb. 37.

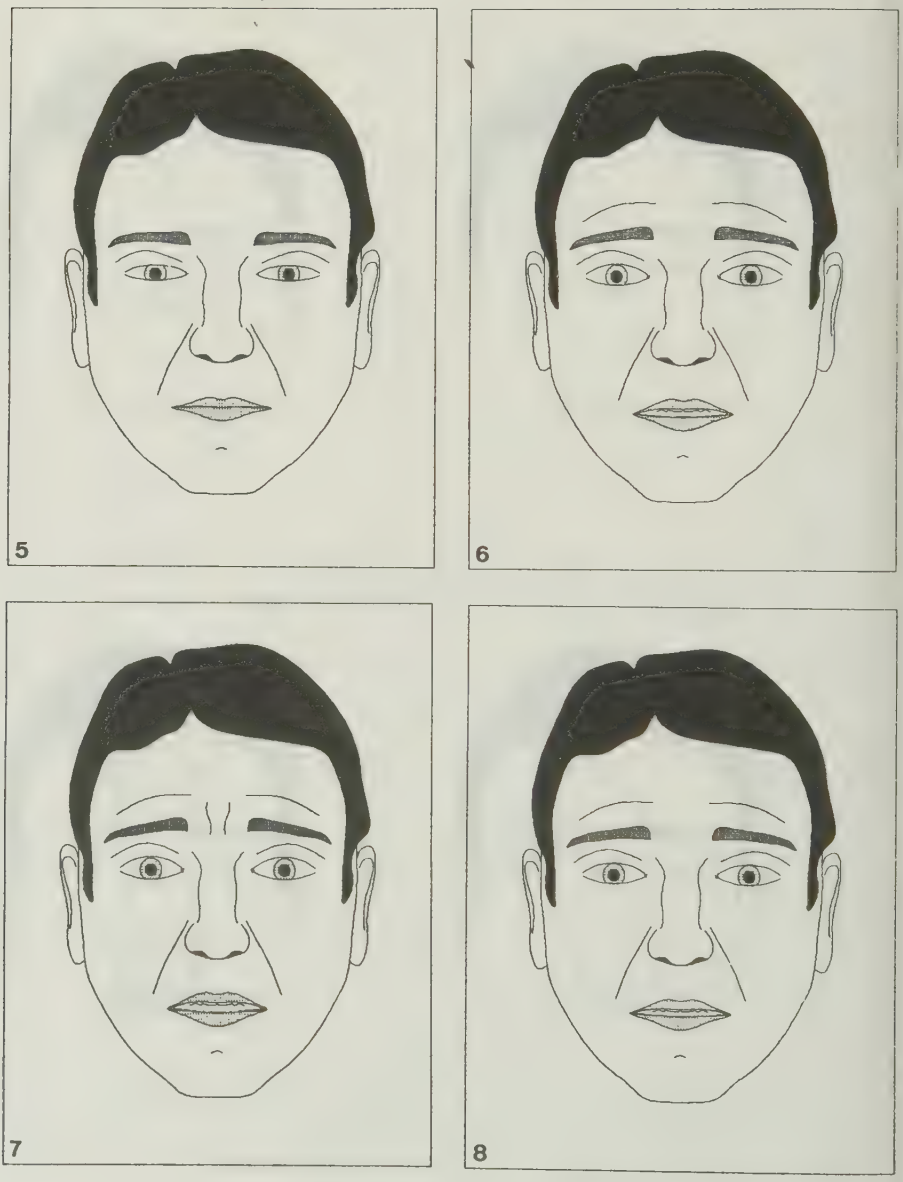
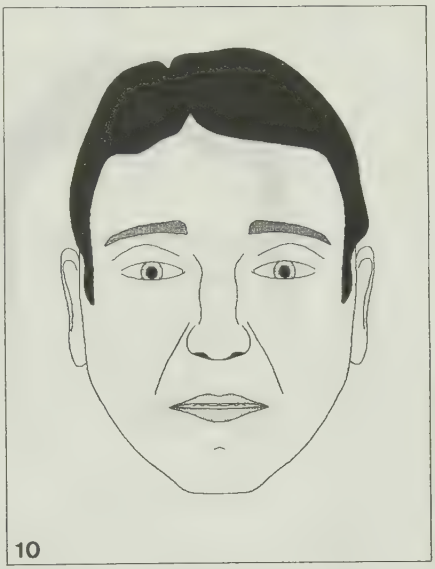
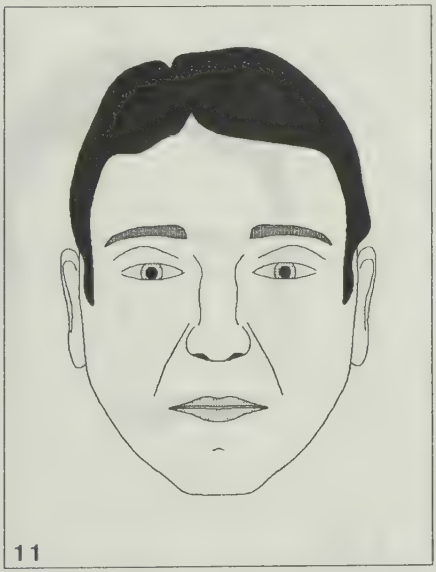


Abb. 38b: Fortsetzung der Mimik-Sequenz zum Reaktionsverlauf der Abb. 37.





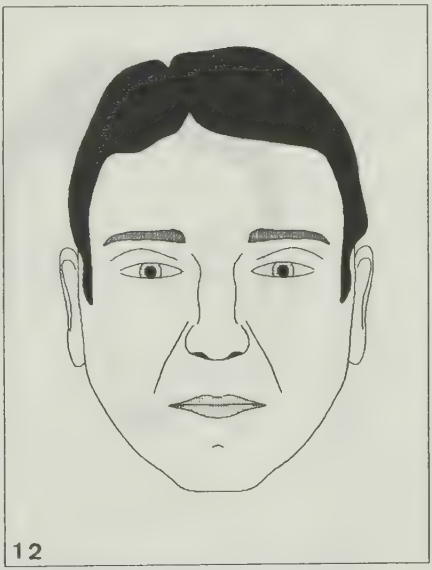


Abb. 38c: Fortsetzung der Mimik-Sequenz zum Reaktionsverlauf der Abb. 37.

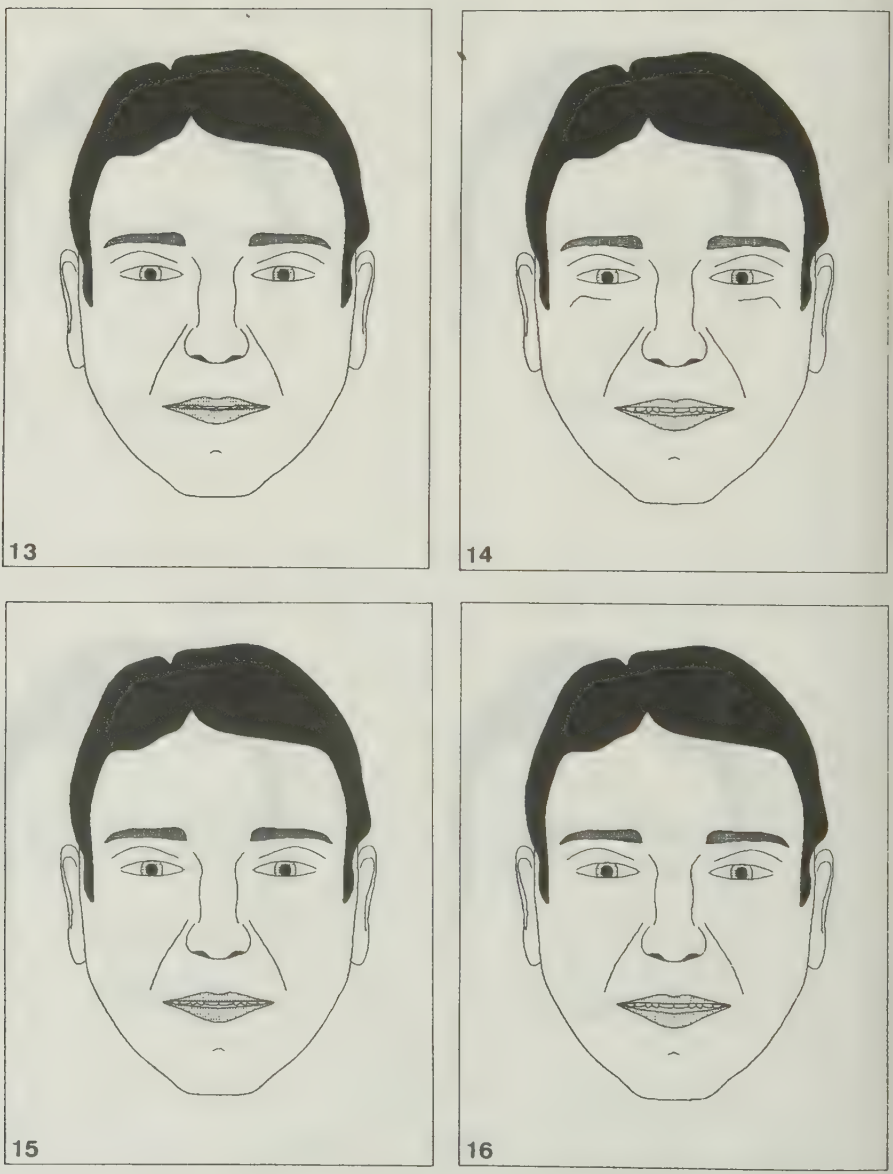


Abb. 38d: Fortsetzung der Mimik-Sequenz zum Reaktionsverlauf der Abb. 37.

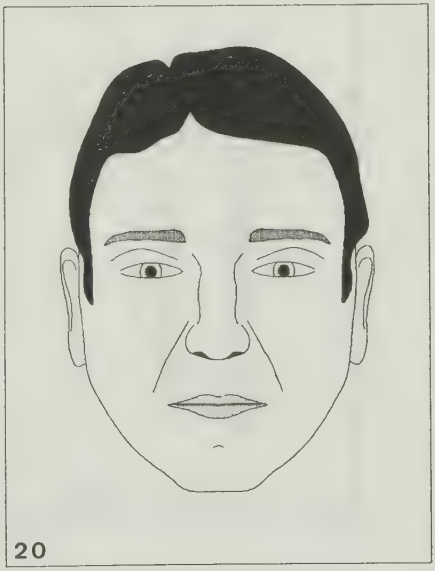


Abb. 38e: Ende der Mimik-Sequenz zum Reaktionsverlauf der Abb. 37.

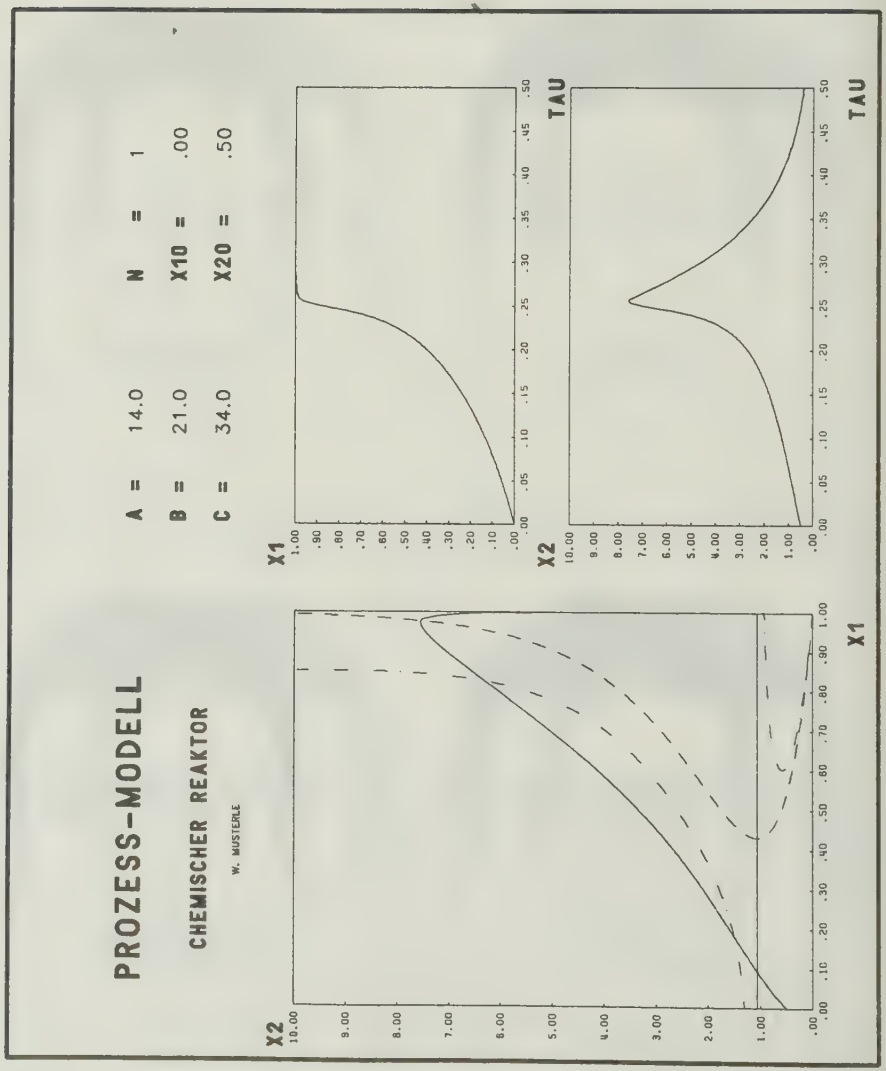


Abb. 39: Typischer Verlauf einer Reaktion: (kritisch)

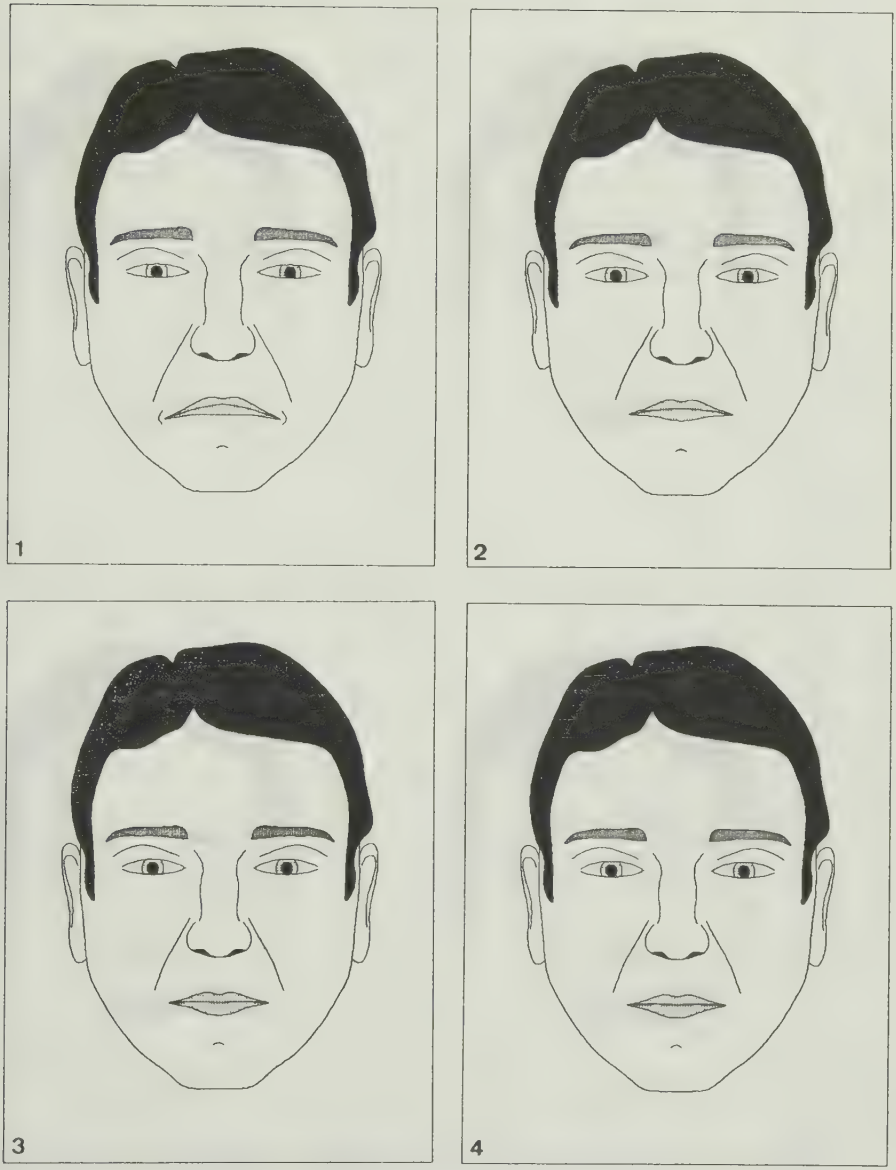


Abb. 40a: Mimik-Sequenz zur Darstellung des Reaktionsverlaufes aus Abb. 39.

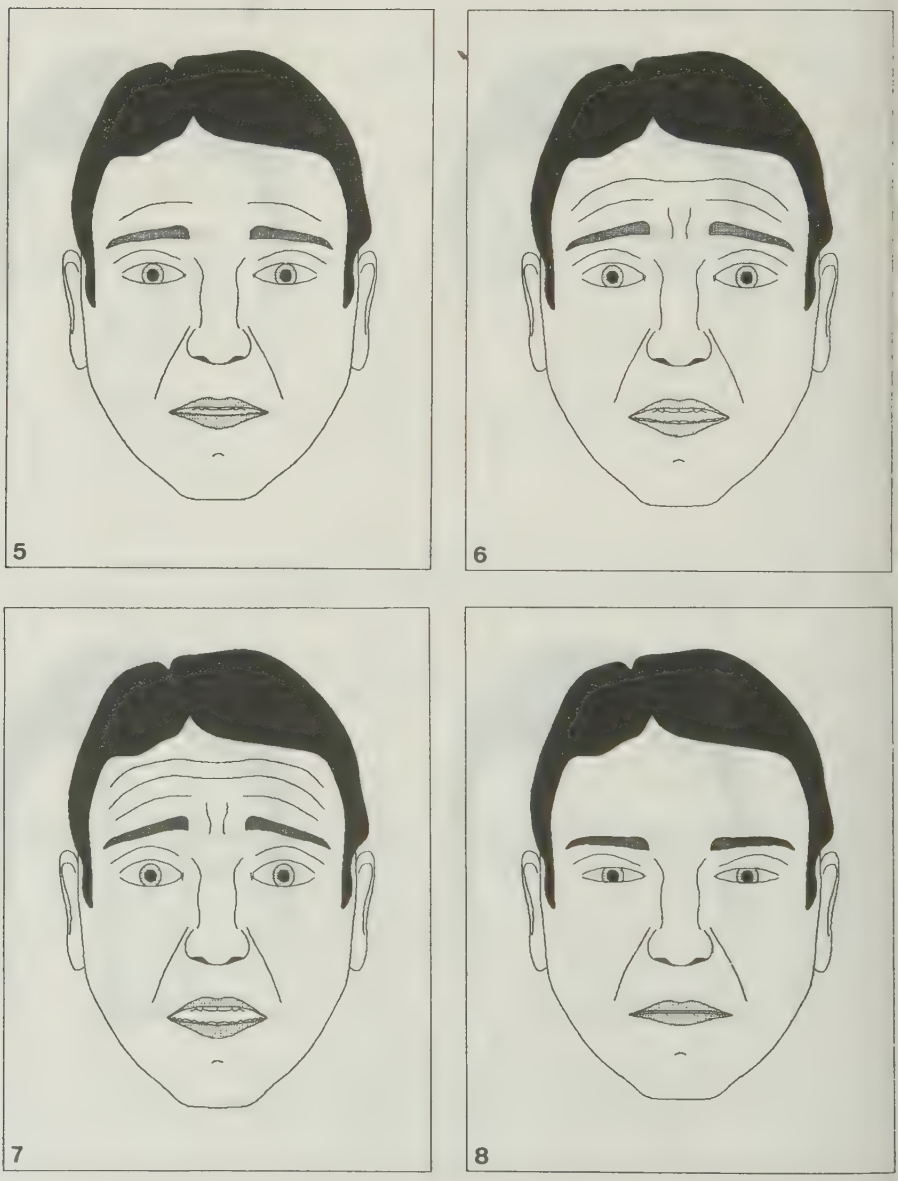
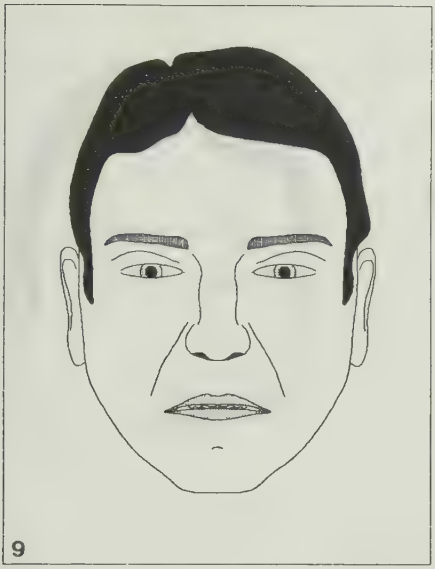
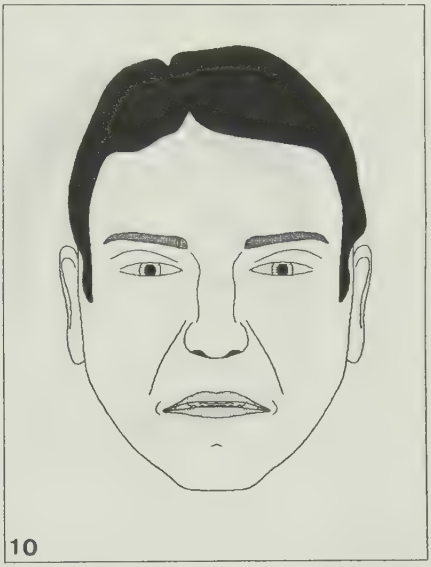
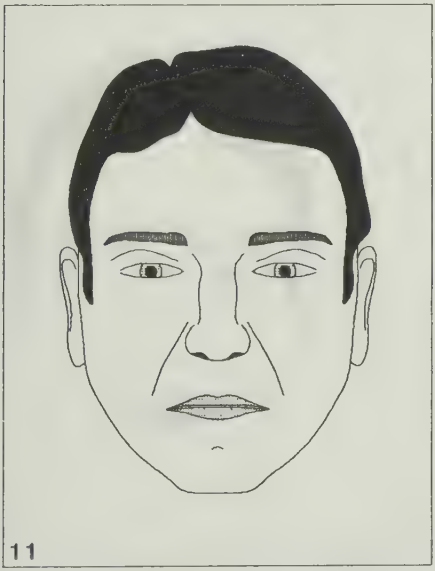


Abb. 40b: Fortsetzung der Mimik-Sequenz zum Reaktionsverlauf der Abb. 39.







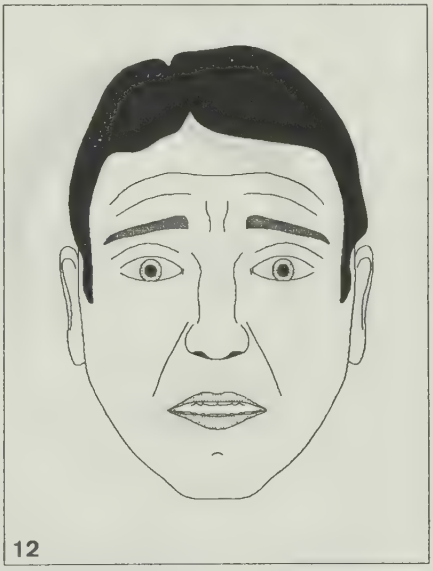
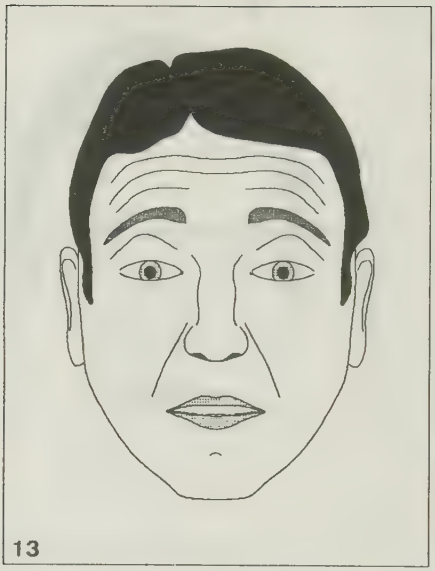
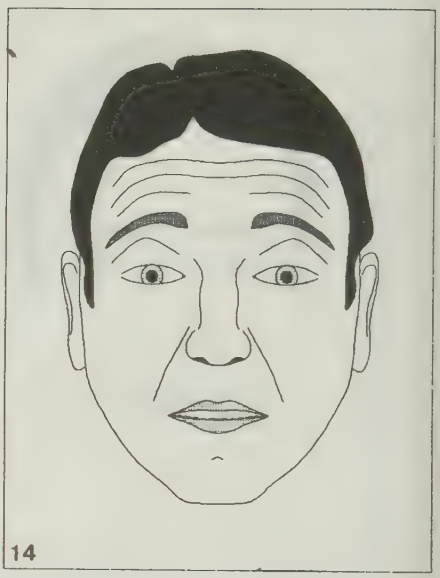


Abb. 40c: Fortsetzung der Mimik-Sequenz zum Reaktionsverlauf der Abb. 39.





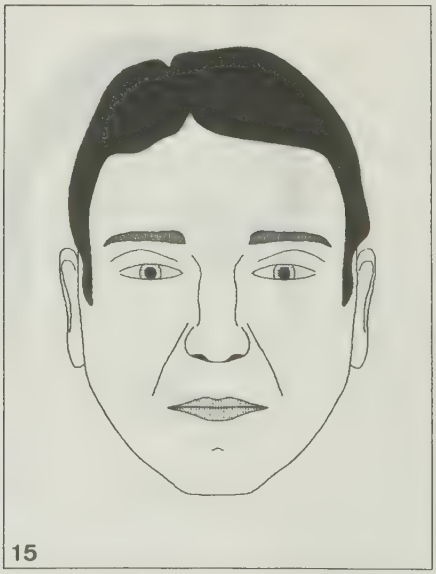


Abb. 40d: Fortsetzung der Mimik-Sequenz zum Reaktionsverlauf der Abb. 39.

Abb. 40e Ende der Mimik-Sequenz zum Reaktionsverlauf der Abb. 39.

3. Praktischer Teil

3.1 Darstellung

Dem Entwurf des Computer-Gesichtes ging eine Analyse der Kopf-Proportionen voraus. Eine halbseitige Skizze eines Gesichtes diente als Vorlage zur Digitalisierung. Durch eine Spiegelung an der angenommenen Symmetrie-Achse Kinn-Stirn in der Gesichtsmitte ergab sich die Gesamtdarstellung des Gesichtes, wie es z.B. die Abb. 30 - 36 zeigen. Um den unnatürlichen Eindruck vollständiger Symmetrie zu brechen, wurde eine asymmetrische Kopfbehaarung gewählt. Zur Verbesserung der Signalwirkung des Gesichtes dienen verschiedene Graustufen bei geschlossenen Bereichen:

schwarz : Haare, Pupillen, Nasenlöcher

dunkelgrau : Augenbrauen

hellgrau : Iris, Lippen

Das gesamte Gesicht besteht aus 442 Punkten, welche zusammen 55 Kurven bilden. Zusätzlich werden 8 Kurven zur Darstellung der Augen berechnet. Der Eindruck glatter Kurvenzüge wird durch eine Glättungsprozedur mittels kubischer Spline-Funktionen (Späth, 1973) erreicht.

Es besteht grundsätzlich die Möglichkeit, durch einfachen Austausch oder durch Modifikation des Datensatzes die Erscheinungsform des Gesichtes zu verändern. Auf diese Weise lassen sich ebensoleicht feminine Gesichtszüge darstellen und simulieren.

3.2 Methode

Das Gesicht wird auf einer gummiartigen zweidimensionalen Unterlage dargestellt und in verschiedene, rechteckige Abschnitte unterteilt (Bild 41). Es werden Stirn-, Nasen-, Lippen- und Wangenbereiche unterschieden. Letzterer kommt dabei rechts- und linksseitig vor. Die Abb. 41 zeigt zur Steigerung der Übersichtlichkeit lediglich einen Wangenbereich. Innerhalb dieser rechteckigen Areale liegen auch die simulierten Muskeln. Die Reaktionen der mimischen Muskulatur sind auf diese Bereiche begrenzt. In Anlehnung an die anatomischen Studien der mimischen Muskulatur von HJORTSJö (1969), EKMAN und FRIESEN (1978), bzw. ELZE und BRAUS (1954) wurde die Lage der einzelnen Muskeln festgelegt. Insgesamt sind 36 Gesichtsmuskeln eingezeichnet. Die Lage und Wirkungsrichtung der Muskeln zeigt Bild 42.

Die Wirkung der menschlichen Gesichtsmuskeln besteht in einer Verkürzung ihrer Längsachse, wobei zumeist ein Muskelende auf dem Schädelknochen verwurzelt ist, und das andere Ende frei in den oberen Schichten der weichen Gesichtsteile verwachsen ist. Dieses Verhalten läßt sich mathematisch sehr einfach durch einen Vektor beschreiben, welcher in die Richtung der Muskellängsachse zeigt und dessen Länge variabel ist.

Jeder Muskel wirkt bei der Simulation in Form einer vektoriellen Translation auf die elastische Unterlage (parallel zur Darstellungsebene) ein, wobei lediglich die Amplitude der Translation, nicht aber die Richtung moduliert werden kann. Die Darstellung der Muskeln durch Vektoren verlangt einige Modifikationen, wie z.B. beim Ringmuskel um die Mundöffnung herum (Orbicularis oris), welcher durch eine Reihe radial wirkender Vektoren nachgeahmt werden muß.

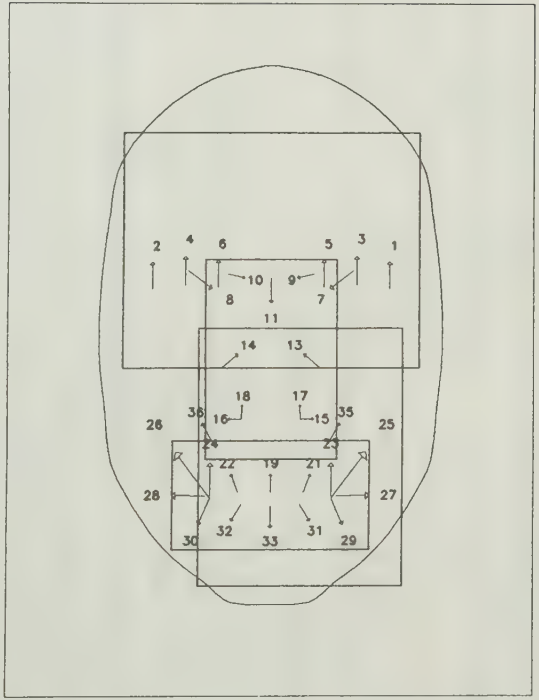


Abb. 41: Gesichts-Areale

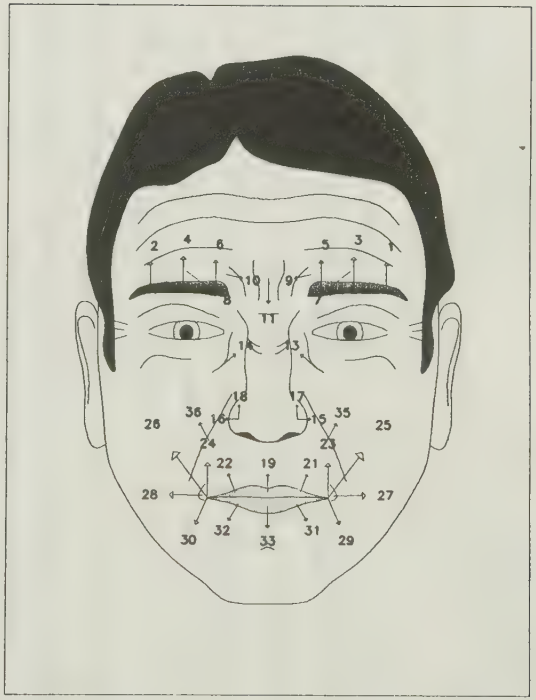


Abb. 42: Lage der Muskel-Vektoren

Die Aktivierung eines Muskelvektors (MV) entspricht physiologisch der Kontraktion eines Muskels oder einer Muskelgruppe. Dabei wird die Vektorbasis zur Vektorspitze hin verschoben. Die Umgebung der Vektorbasis wird dabei abnehmend mit wachsendem Abstand zur Basis ebenfalls mitverschoben, wobei eine lineare Proportionalität verwendet wird, (vergl. Bild 43). Das Modell basiert somit auf der Vereinfachung, daß die Kräfte über die Entfernung der weichen Gesichtsteile linear abnehmen. Ebenso bleibt die Zugrichtung innerhalb eines Gesichtsbereiches parallel zur Translationsrichtung eines aktiven Muskelvektors.

Die Translation durch Muskelaktivitäten verschwindet an den Rändern der einzelnen Abschnitte, wodurch die mimische Reaktion auf das Gebiet begrenzt bleibt. Lediglich der Mundbereich wirkt durch Kopplungsvektoren (MV 37 und MV 40) auf die Wangenbereiche ein. Effektiv endet jedoch die Verschiebung der Umgebung in den meisten Fällen bereits vor dem Gebietsrand. Das von einer Muskelreaktion betroffene Gebiet wird durch zwei, zu den Rändern parallele Achsen in vier Quadranten unterteilt, deren Kreuzungspunkt in der Vektorbasis des aktiven Muskelvektors liegt. Die Achsenschenkel werden nun als Halbachsen einer Ellipse im eingeschlossenen Quadranten interpretiert. Diese Viertelellipsen bezeichnen die Grenze einer möglichen Translation. Im Bild 43 markieren die punktierten Pluszeichen die Lage der unverschobenen Rasterkreuzpunkte. An ihrer Verteilung läßt sich die elliptische Translationswirkung (durchgezogenes Raster) erkennen (insbesondere im linken Bildteil).

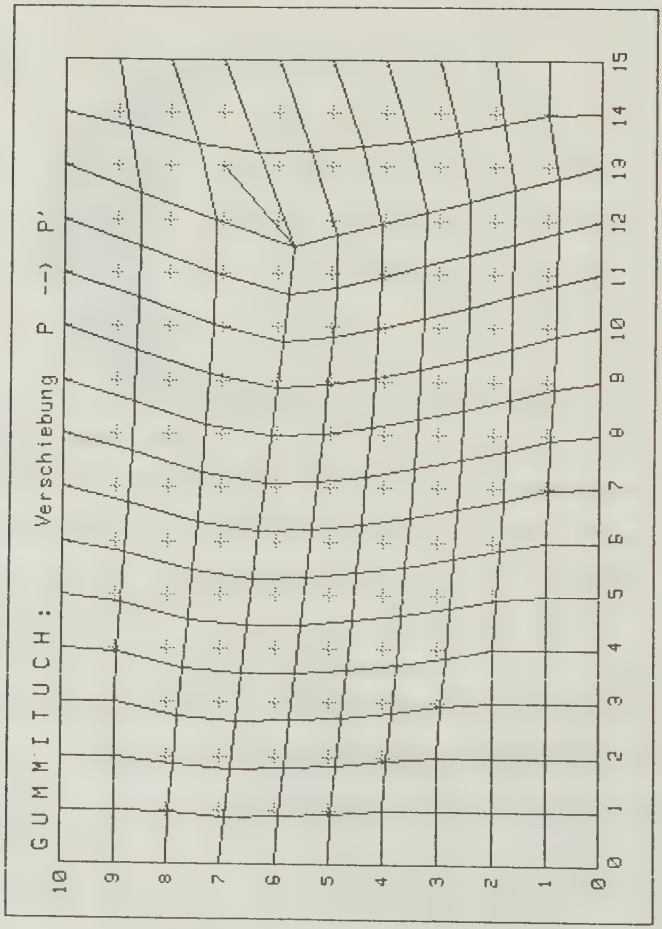


Abb. 43: Gummituch-Simulation.
Verschiebung des Punktes P(13/7) nach P'(11.5/5.7)

Komplexe emotionale Mimik erfordert ebenso komplexe Muskelreaktionen durch das Zusammenwirken mehrerer Muskeln oder Muskelgruppen. Um dies zu erreichen, muß eine Aktivierung mehrerer Vektoren gleichzeitig erfolgen, wobei durch Superposition der Einzelreaktionen ein Gesamteindruck der Mimik entsteht. Manche Linien werden dabei erst sichtbar, nachdem bestimmte, auf diese Linien einwirkende Muskelvektoren eine festgelegte Aktivitätsschwelle überschritten haben. Dieses Verhalten ist insbesondere im Stirnbereich ausgeprägt (vergl.z.B. Überraschungsdisplay Bild 35).

Bei einer öffnung des Mundes erfolgt zunächst die Berechnung der Linienlagen im Mundbereich aufgrund von mimischen Muskelreaktionen dieses Gebietes. In einer nachfolgenden Operation wird dann der gesamte untere Gesichtsbereich ab der Unterkante des Philtrums (Einbuchtung oberhalb der Oberlippe) linear verzerrt. Das Kinn erfährt dabei die größte Verschiebung. Die Lippenspalte öffnet sich ebenfalls, so daß der Eindruck des bewegten Unterkiefers entsteht. Durch einen aufwendigen Hidden-Line-Algorithmus werden die Zahnreihen je nach Lippenstellung im geöffneten Mund sichtbar.

Die Augendarstellung erfolgt durch direkte Berechnung. Es sind keine Linienkoordinaten vorgegeben. Die Augenränder werden durch Kreissegmente dargestellt. Auch hier ist ein schneller Hidden-Line-Algorithmus integriert, um die Abdeckung von Teilen der Iris durch die Lidstellung zu ermöglichen.

Sowohl die Augenbewegungen (auf, ab, hin und her) und der Lidschlag, als auch die Mundöffnung sind parameterabhängig modulierbar (5 Parameter). Insgesamt können somit 38 Parameter zur Gestaltung des mimischen Ausdrucks frei wählbar angegeben werden.

Mit diesem Programm erschließt sich die Vielfalt und die Komplexität des mimischen Ausdrucks einer systematischen Untersuchung unter reproduzierbarer Kontrolle aller Parameter, mit der Möglichkeit einer unkomplizierten und flexiblen Anwendung im technischen und ergonomischen Bereich.

3.3 Basis-Mimik

Neben der Aktivierung einzelner Muskelvektoren besteht auch die Möglichkeit ein Ensemble von "Muskeln" gleichzeitig anzusprechen. Das Ergebnis ist die Generierung eines ganzen mimischen Ausdrucks. Die Parameter eines Ensembles sind fest gespeichert. Auf diese Weise lassen sich die Gesichtsausdrücke der Grund-Emotionen (vergl. Abschnitt 2.6) darstellen (Abb. 30 - 36). Sie sind die Grundlage zur Generierung der Bildserien des Reaktordisplays und werden nach Bedarf aufgerufen. Die einzelnen, mit maximaler Intensität gespeicherten Muskelaktivitäten werden zur Darstellung lediglich mit der geforderten Intensität skalar multipliziert, so daß alle geforderten Intensitäten darstellbar sind.

Die Gestalt der unabhängigen mimischen Basis-Ausdrücke wurde interaktiv am graphischen Computer-Terminal erstellt, wobei die EKMAN'schen Fotos (EKMAN und FRIESEN, 1975), die Bilder des Facial-Action-Coding-Systems (EKMAN und FRIESEN, 1978), sowie die Zeichnungen von HJORTSJÖ (1969) zugrunde gelegt wurden. Die Kontrolle der Reliabilität erfolgte durch Mimikerkennungsversuche freiwilliger Versuchspersonen.

Bei der Überlagerung (Mischung) zweier verschiedener Mimiken wird eine Linearkombination der einzelnen Muskelaktivitäten in Form einer Mittelwertsbildung durchgeführt, sofern beide Muskelaktivitäten ungleich Null sind. Ansonsten bleibt die Aktivität unverändert.

4. Ausblick

Das MIMIK-Programm erlaubt die Erstellung beliebiger Gesichtsausdrücke. Durch die vielseitige Arbeitsweise des Programmes eröffnen sich daher die unterschiedlichsten Anwendungsbereiche. Eine interessante Perspektive ist dabei die Möglichkeit asymmetrische Mimiken durch Mischung zweier verschiedener halbseitiger Gesichter darzustellen (vergl. Bild 44). Die hohe Empfindlichkeit des menschlichen Wahrnehmungsvermögens gegenüber Symmetrieabweichungen legt deren Nutzung nahe. Als mögliche Anwendungen sind beispielsweise die vergleichende Darstellung des Ist- und des Soll-Wertzustandes eines Reaktors denkbar. In ähnlicher Weise lassen sich ebenso der augenblickliche und zukünftige (prädiktierte) Zustand eines chemischen Reaktors für das überwachungspersonal darstellen. Beide Displaymodi sind gleichermaßen nützlich, so daß die Wahl von den Einsatzbedingungen und der jeweils gestellten Problematik abhängig gemacht werden muß.

Darüberhinaus beschränkt sich die Diskussion nicht nur auf chemische Reaktoren. Obwohl aufgrund der gegenwärtigen Situation in der chemischen Industrie die Anwendung eines ergonomischeren Anzeigeinstrumentes äußerst wünschenswert wäre, kann ebensoleicht bei überwachungsaufgaben anderer, multivariabler Zustände und Prozesse ein mimisches Anzeigeinstrument zur Diagnose eingesetzt werden. Je nach Problemstellung ist lediglich eine Anpassung des Reaktionsmodell-Programmes notwendig.

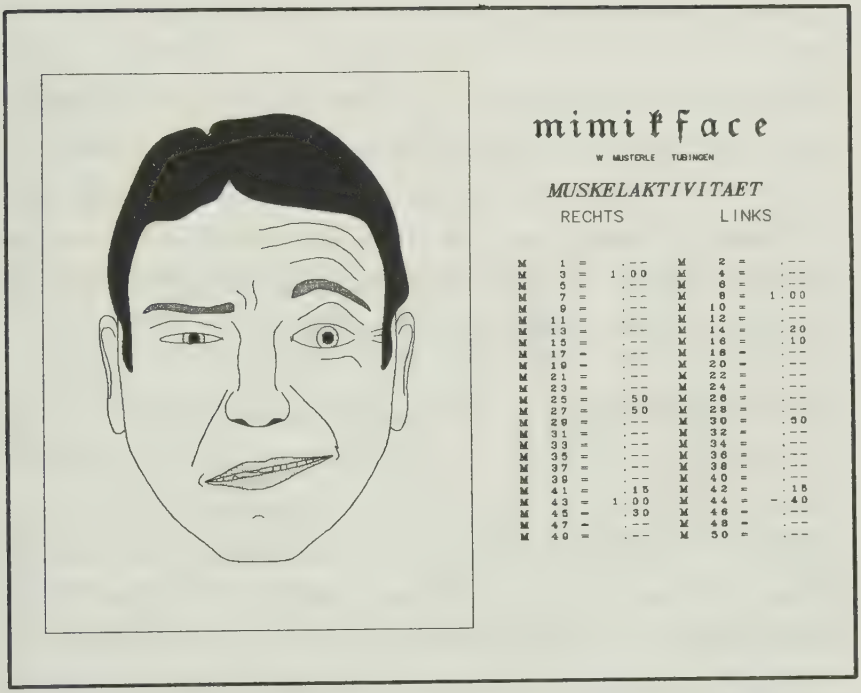


Abb. 44: Beispiel für ein asymmetrisches Mimik-Display mit Parameterangabe

Die Trennung der Programme (vergl. Abschnitt 5) nach ihren Aufgabenbereichen läßt auch deren getrennte Anwendung zu. In allen Bereichen, wo eine Kommunikation im Mensch-Maschine-System im Rahmen von Überwachungsfunktionen stattfindet, kann zur Verbesserung der Arbeitsplatzbedingungen und damit auch der Effizienz das vorgestellte Display zur Anwendung kommen.

Selbst die bloße Anwendung als reines multidimensionales Diagramm, ohne Bedeutungsinhalt im bisher genannten Sinne, ähnlich wie das CHERNOFF-Face, ist möglich. Immerhin lassen sich bei symmetrischer Darstellungsweise dreiundzwanzig Parameter darstellen, oder bei asymmetrischer Darstellung entsprechend doppelt so viele. Niederdimensionale Datensätze können auch durch Aktivierung der Basismimiken wiedergegeben werden.

Die intensive Beschäftigung verschiedener Humanwissenschaften mit der menschlichen Mimik legt die Anwendung des vorliegenden Displays auch in diesem Bereich nahe. Bisherige Versuche zum Computereinsatz bilden den mimischen Ausdruck reduziert nach, indem Bildvorlagen lebender Versuchspersonen von Hand digitalisiert werden (THRONTON und PILOWSKY, 1983; PILOWSKY, THRONTON und STOKES, 1985). Die so gewonnenen Rohdaten unterliegen naturgemäß Schwankungen. Zur Erzeugung willkürlicher mimischer Ausdrücke sind Ethologen, Psychologen und Psychiater dagegen bisher ausschließlich auf die Ausdrucksfähigkeit mimisch begabter Personen oder Schauspieler angewiesen, was einer exakten Reproduzierbarkeit oft wenig dienlich ist. Demgegenüber ist der computergenerierte, mimische Ausdruck genau parametrisiert (vergl. Abb. 44) und somit jederzeit problemlos reproduzierbar. Auch die Mischbarkeit stimmungsreiner Ausdrücke eröffnet neue Möglichkeiten und Einsichten (vergl. MUSTERLE und RÖSSLER, 1986).

5. Hardware und Software

Das Programm wurde im Rechenzentrum der Universität Stuttgart erstellt. Als Mainframe mit Interaktivbetrieb stand eine CYBER 174 von Control Data zur Verfügung. An einem Grafik-Bildschirm Tektronix 4012 konnten die Bilder interaktiv aufgebaut werden. Inzwischen ist es auch möglich, an einem graphischen Farbterminal CIT 161 zu arbeiten. Für Dokumentationszwecke in schwarz-weiß war die Möglichkeit der Ausgabe auf einem Elektrostat Plotter vom Typ Versatec gegeben.

Das Rechenzentrum unterstützt die Erstellung graphischer Ausgaben durch ein Plotsystem namens "PICASSO" (vergl. WINTER und BEISSER, 1985), welches aus der Kombination mehrerer Graphikplotpakete entstand, unter Integration von Plotter-Basis-Software von Calcomp, sowie von Eigenentwicklungen des Rechenzentrums.

Die Rechenzeit an der CYBER 174 beträgt bei der Reaktor-Simulation ungefähr 1.5 Sekunden pro Reaktionsverlauf. Ein erheblicher Teil der Rechenzeit wird dabei zur graphischen Darstellung der Zustandsfunktionen benötigt. Eine Berechnung eines mimischen Ausdrucks erfordert etwa 0.8 - 2.1 Sekunden CPU-Zeit, wobei die Rechenzeit mit der Anzahl aktiver Muskeln leicht variiert. Zwei Sekunden CPU-Zeit benötigt man zur Generierung der Software-Schrift der Parameterliste (vergl. Abb. 41). Eine schnellere Version ist in Vorbereitung.

Das Simulationsprogramm "MIMIK" benötigt zum Betrieb mindestens zwei Datenfiles, welche die Daten der Linien zur Darstellung des Gesichtes enthalten. Das File DFACE enthält die Punktkoordinaten in Form einer langen Liste, während das andere Datenfile namens CFACE die Information trägt, wo der Anfang einer bestimmten Linie in 'DFACE' liegt und wieviele Koordinatenpunkte diese Linie bilden. Darüberhinaus kann noch ein Datenfile vorliegen (SFACE), das Informationen zur Erzeugung einer Bildsequenz enthält. Beispiele für das Datenfile 'SFACE' finden sich im Anhang (Abschnitte 7.1 - 7.2). Sämtliche Datenfiles sind austauschbar, falls eine andere Darstellung gewünscht wird.

5.1 Das Reaktionsmodell-Programm

Das Simulationsprogramm "REAKTOR" berechnet die dimensionslosen Zustandsvariablen X1 (Reaktionsfortschritt als Maß für die Konzentration der Produkte) und X2 (Maß für die Temperatur), sowie die Koordinaten der Ortskurven für das Temperaturmaximum und die kritische Grenzkurve. Die dazu notwendigen Parameter der Reaktion werden interaktiv eingegeben. Es handelt sich dabei um die dimensionslosen Größen

a..... Adiabatische Temperaturerhöhung (vergl. Gl. 10)

b..... Kühlintensität (vergl. Gl. 10)

c..... Arrhenius-Faktor (vergl. Gl. 10)

X10... Anfangskonzentration der Produkte

X20... Anfangstemperatur (vergl. Gl. 10)

Die Entwicklung der chemischen Reaktion wird in Form dreier Schaubilder dargestellt. Zum einen werden die Verläufe der beiden Zustandsvariablen X1 und X2 in Abhängigkeit von der dimensionslosen Zeit Tau dargestellt, zum anderen wird der Reaktionsverlauf in der Zustandsebene wiedergegeben. Zusätzlich werden die Ortskurve des Temperaturmaximums und die Ortskurve der Wendepunkte in die Zustandsebene eingezeichnet (vergl. Bild 34 und 36).

Darüberhinaus wird auch ein Datenfile namens "SFACE" generiert, welches die Eingabedaten des mimischen Displays enthält. In einem darauf folgenden Rechenprozeß kann dieses Datenfile durch das Mimik-Simulations Programm weiterverarbeitet werden (vergl. Abb. 35 und 37).

5.2 Das Mimik-Programm

Das Computerprogramm "MIMIK" ist in FORTRAN 5 formuliert. Seine Bedienung erfolgt weitgehend interaktiv und ist menuegesteuert. Fehlerhafte Eingaben werden durch eine interne Fehlererkennung abgefangen, wobei die Art des Fehlers dem Benutzer augenblicklich mitgeteilt wird, so daß eine erfolgreiche Korrektur möglich ist.

Das Programm-Menue zeigt siebzehn verschiedene Arbeitsmodi, deren letzter Punkt die Beendigung des Programmes bewirkt. Tab. 7 zeigt das Hauptmenue, mit dessen Hilfe der Benutzer geführt wird. Eine Umgehung dieses Menues ist nicht vorgesehen. Für den Fall der Eingabe eines falschen Menue-Punktes kann der gewählte Modus sofort wieder durch einen Rücksprung in das Hauptmenue verlassen werden. Der Rücksprungcode ist einheitlich '-99' . Im folgenden werden die einzelnen Menue-Punkte erläutert.

Tabelle 7: Haupt-Menue des Programms

1. ... Einzelbild-Eingabe
2. ... Einzelbild-Korrektur
3. ... Einzelbild-Entwicklung
4. ... Einzelbild-Zufallsmimik

5. ... Mimik-Aufruf
6. ... Mimik-Einzelserie
7. ... Mimik-Linearkombination
8. ... Mimik-Lorenz-Matrix
9. ... Mimik-Sequenzeingabe

10. ... Wahl der Symmetrie
11. ... Wahl des Grundgesichtes
12. ... Wahl der Verzerrungsfaktoren

13. ... Info.: Gespeicherte Mimik-Parameter
14. ... Info.: Lage der Muskelvektoren
15. ... Info.: Eingestellte Parameter

16. ... Store: Speichern der Mimik-Parameter

17. ... Stop ! Programm - Abbruch

Punkt 1: Einzelbild-Eingabe: Es kann ein einzelner mimischer Ausdruck erzeugt werden, indem die einzelnen Muskeln wahlfrei aktiviert werden. Vom Programm wird dazu die Nummer des zu aktivierenden Muskels und dessen Intensität der Aktivierung erfragt. Diese Fragen werden solange wiederholt, bis anstelle einer Muskelnummer eine Null eingegeben wird. Null ist der Code für die Beendigung der Eingabe. Anschließend wird die Lage der Linien berechnet und das Bild generiert. Als nächstes kann ein weiterer Ausdruck auf die selbe Art erzeugt werden, oder es erfolgt auf Wunsch der Rucksprung ins Menue (Code '-99'). Die Parameter des vorausgehenden Bildes werden vor jedem neuen Durchlauf gelöscht.

Punkt 2: Einzelbild-Korrektur: Dieser Menuepunkt ermöglicht die geringe Korrektur einer einzelnen Muskelaktivität. Durch die Angabe der Muskelnummer wird - je nach Vorzeichen - die Aktivität verringert (bei negativem Vorzeichen) oder vergrößert (bei positivem Vorzeichen bzw. ohne Vorzeichen). Die Schrittweite der Änderung beträgt jeweils 0.1. Nach jeder Eingabe wird der mimische Ausdruck neu berechnet und angezeigt. Die vorherigen Parameter bleiben dabei selbstverständlich erhalten. Ein interaktives Modellieren beliebiger mimischer Ausdrücke ist so möglich. Der Korrekturmodus kann auf alle einzeln erzeugten Parametersätze angewendet werden. Bei Bilderserien (Modus 6,8,9) besteht diese Möglichkeit prinzipiell nur beim zuletzt erzeugten Bild.

Punkt 3: Einzelbild-Entwicklung: Eine Kombination der Menuepunkte 1 und 2 wird hier durch die automatische Kopplung beider erreicht. Zunächst kann eine Basismimik in ihrer Gesamtheit durch wahlfreie Aktivierung einzelner Muskelvektoren entsprechend Modus 1 erstellt werden. Diese wird angezeigt und kann anschließend o h n e expliziten Aufruf aus dem Menue direkt im Modus 2 korrigiert werden .

Punkt 4: Einzelbild-Zufallsmimik: Die Wahl dieses Punktes erzeugt Zufalls-Mimik. Die Anzahl der aktiven Muskeln kann vorgewählt oder dem Zufall überlassen werden; ebenso die Intensität der einzelnen Muskelaktivitäten. Die Wahl der aktiven Muskelvektoren erfolgt durch einen eingebauten Pseudozufallsgenerator mit gleichverteilten Zufallszahlen.

Punkt 5: Mimik-Aufruf: Im Programm sind die mimischen Ausdrücke der Grund-emotionen nach EKMAN in Form ihrer Parameter fest gespeichert. Die Wahl von Punkt 5 ermöglicht es, die einzelnen Parameter-Mengen zu aktivieren, wobei die einzelnen Gesichtshälften getrennt oder gemeinsam aufgerufen werden können. Die Intensität des Ausdrucks kann ebenfalls variiert werden.

Existiert die Möglichkeit der Datenspeicherung in einer Daten-bank, so kann unter diesem Punkt ein gespeicherter Datensatz aufgerufen werden.

Punkt 6: Mimik-Einzelserie: Es wird hier ein Satz von Bildern einer Grundemotion mit unterschiedlichen Intensitäten generiert. Außer dem Neutralgesicht (Intensität 0) wird der mimische Ausdruck symmetrisch oder asymmetrisch in vier Stufen dargestellt: 0.25, 0.5, 0.75 und 1.0. Die Anfangs- und Endintensität jeder Seite kann in Grenzen frei gewählt werden, wobei sich der Faktor auf die Differenz zwischen Anfangs- und Endintensität bezieht.

Punkt 7: Mimik-Linearkombination: Die Möglichkeit der Erzeugung von gemischten mimischen Ausdrücken ist ebenfalls möglich. Je Gesichtshälfte können zwei verschiedene Mimiken miteinander linearkombiniert werden. Eine asymmetrische oder eine symmetrische Darstellung ist möglich (Punkt 10). Der Mischausdruck weist in seinem Parametersatz die arithmetischen Mittelwerte aktivierter Muskeln gleicher Nummer auf. Wenn nur der eine Ausdruck eine von Null verschiedene Muskelaktivität aufweist, dann tritt sie unverändert im Mischausdruck auf.

Punkt 8: Mimik-LORENZ-Matrix: Eine Serie von 9 Bildern wird erzeugt. Sie ergeben die LORENZ-Matrix der Linearkombination zweier mimischer Ausdrücke (MUSTERLE und RÖSSLER, 1986).

Punkt 9: Mimik-Sequenzeingabe: Die Erzeugung einer willkürlichen Bilderfolge kann über Punkt 9 des Menues erfolgen. Es besteht die Möglichkeit aus einer vorhandenen Datei Namens SFACE Bilddaten einzulesen. Vorhandene Dateien werden nicht geprüft. Eine

eigenverantwortliche Kontrolle fremderzeugter Dateien ist daher unumgänglich. Es können lediglich EKMAN'sche Basismimiken verwendet werden, es sei denn, eine Datenbank steht zur Verfügung (vergl. Punkt 5), so daß die dort gespeicherte Mimiken verwendet werden können.

Punkt 10: Wahl der Symmetrie: Es besteht grundsätzlich die Möglichkeit, symmetrische oder asymmetrische Mimik zu generieren. Voreingestellt ist die symmetrische Darstellung. Hierbei erfolgt in jedem Punkt des Menues lediglich die Eingabe der Daten für eine Gesichtshälfte (ungerade Nummern). Diese unvollständige Dateneingabe erleichtert und beschleunigt die Kommunikation mit dem Programm. Lediglich bei der Wahl asymmetrischer Darstellung ist eine vollständige Dateneingabe, die beide Gesichtshälften einbezieht, notwendig.

Punkt 11: Wahl des Grundgesichtes: Die Ortskoordinaten der Gesichtslinien sind modifizierbar, so daß das Erscheinungsbild des Gesichtes verschiedenen Ansprüchen angepaßt werden kann. Zur Zeit wird an einem Datensatz gearbeitet, welcher ein weibliches Grundgesicht darstellt. Damit stehen schließlich zwei Gesichtstypen zur Wahl, die naheliegenderweise "Adam" und "Eva" genannt werden. Der Punkt 11 erlaubt (nach Vorliegen beider Datenfiles) die Wahl zwischen diesen beiden Gesichtstypen.

Punkt 12: Wahl der Verzerrungsparameter: Sollte der Benutzer lediglich die Form des Gesichtes länglicher oder breiter dargestellt wünschen, so kann dies leicht durch Änderung des Darstellungsmaßstabes in x- und y-Richtung bewerkstelligt werden. Im Punkt 12 des Menues können hierzu zwei entsprechende Parameter eingegeben werden.

Punkt 13: Info.: Gespeicherte Mimik-Ausdrücke: Dieser Informationsaufruf gibt eine Übersicht über die gespeicherten Grundemotionen und deren Code-Nummern für deren Aufruf in den Punkten 5 bis 9.
Bei der Speicherung der Datensätze in einer Datenbank wird deren Inhalt angezeigt.

Punkt 14: Info.: Lage der Muskelvektoren: Es wird nach der Wahl dieses Punktes augenblicklich ein Gesicht angezeigt, das sämtliche Linien und Muskelvektoren, sowie deren Nummern wiedergibt. Ein schneller Überblick über die Lage der einzelnen Muskeln und deren voraussichtliche Wirkung ist somit möglich. Das Ergebnis zeigt Bild 39.

Punkt 15: Info.: Voreingestllte Werte: Der Aufruf von Punkt 15 des Menues gibt einen kurzen Überblick über die aktuell eingestellten Werte der Verzerrungsfaktoren (Punkt 12), des Grundgesichtes (Punkt 13) sowie des Symmetrie-Faktors (Punkt 10).

Punkt 16: Store: Speichern der Mimik-Parameter: Falls eine Kopplung mit einer Datenbank vorliegt, können über diesen Punkt die Mimik-Parameter in die Datenbank eingebracht werden. Die Speicherung erfolgt nach Gesichtshälften getrennt, wobei die beiden Datensätze mit Namen bezeichnet und mit aufeinanderfolgenden Nummern versehen werden.
Die Kopplung mit einer Datenbank ist im Rechenzentrum Stuttgart nicht möglich, so daß das beiliegende Listing diese Möglichkeit nicht beinhaltet. Es existiert allerdings eine Version dieses Programms am Max-Planck-Institut für Psychiatrie in München, welches diese Erweiterung aufweist. Das Programm ist damit wesentlich einfacher den diversen Benutzeransprüchen anzupassen.

Punkt 17: Stop: Es erfolgt der Abbruch des Programms.

6. Literatur

ABRAMS, B., 1981, "With Computer Help, Marketing Professor Faces Up to Corporations' Financial Data", Wall street journal, Wed., July, 22, Princeton

ANDREWS, D.F., 1972, "Plots of High Dimensional Data", Biometrics, 28, 125-136.

BAUERFEINDT, 1982, "Mimische Schemata", Max-Planck-Institut fur Psychiatrie Sozialpsychologie, München.

BRUCKNER, L.A., 1978, "On CHERNOFF Faces", in WANG, 1978, S. 93 - 121

BRUCKNER, L.A. und MILLS, C.F., 1979, "Interactive Use of Computer Drawn Faces to Study Multidimensional Data", Los Alamos Scientific Lab., NM (USA), Mar. 1979, 30 p., LA 7752 MS.

CAROL, M., 1978, "Graphics: From Alpha to Omega in Data Analysis" in WANG, 1979, S. 59 - 92.

CHERNOFF, H., 1971, "The Use of Faces to Represent Points in n-Dimensional Space Graphically"; Technical Report No. 71, Department of Statistics,Stanford University.

CHERNOFF, H., 1973, "Using Faces to Represent Points in K-Dimensional Space Graphically,"; J. American Statistical Association, 68, 361-368.

DARWIN, C., 1872, "The Expression of the Emotion in Man and Animals": John Murray, London; Reprinted: University of Chicago Press, 1965.

DENZEL, B. and SEELIG, F.F., 1978: "Calculation of Separatrices in Multistable Chemical Reaction Systems": Z. Naturforsch. 33a, 1341-1345.

EIBL-EIBESFELDT, I., 1972, "Similarities and Differences Between Cultures in Expressive Movements": pp. 297-314 in Hinde (ed.) Nonverbal Communication. Cambridge University Press

EIBL-EIBESFELDT, I., 1984, "Die Biologie des menschlichen Verhaltens. Grundriß der Humanethologie", Piper, München, Zürich.

EKMAN, P. und FRIESEN, W.V., 1971, "Constants across Cultures in the Face and Emotion", Journal of Personality and Social Psychology 1971, 17 (2), 124-129.

EKMAN, P., 1972, "Universals and Cultural Differences in Facial Expression", in COLE, J.K. (Herausgeber) "Nebraska Symposium on motivation", 1971, Lincoln, Nebraska: University of Nebraska.

EKMAN, P., FREISEN, W.V., und ELLSWORTH, P., 1972, "Emotion in the Human face: Guidlines for Research and an integration of findings", New York: Pergamon Press.

EKMAN, P., 1973, "Darwin and Facial Expression. A Century of Research in Review". New York, Academic Press.

EKMAN, P., FRIESEN, W.V., 1975, "Unmasking the Face. A Guide to Recognizing Emotions from Facial Expressions.": Englewood Cliffs, New Jersey.

EKMAN, P., FRIESEN, W.V., 1978, "Facial Action Coding System", Consulting Psychologiste Press Inc., Palo Alto, California.

ELZE, C. und BRAUS, H., 1954, "Anatomie des Menschen", Band I, Springer Verlag, Berlin.

ENTWISLE, D. und HUGGINS, W., 1973, Child Development, 44 : 392.

FLURY, B. und RIEDWYL, H., 1981, "Graphical Representation of Multivariate Data by means of Asymmetric Computer Faces", J. Am. Stat. Assoc. 76, 757-765.

FLURY, B. und RIEDWYL, H., 1983, "Angewandte multivariate Statistik, Computergestützte Analyse mehrdimensionaler Daten", G. Fischer-Verlag, Stuttgart

FRANK, H., 1970, "Informationspsychologie". In: Helmar Frank (Herausgeber): "Kybernetik - Brücke zwischen den Wissenschaften", S. 243-258, Umschau Verlag, Frankfurt am Main.

GILLES, E.D., 1976, "Reactor Models", 4th Int. Symp. on Chemical Reaction Engng., Heidelberg

GILLES, E.D., 1977, "Dynamisches Verhalten von Festbettreaktoren", Chem.-Ing.-Tech. 49 (1977) Nr.2, 142-149.

GILLES, E.D., 1979, "Modellbildung, ein Hilfsmittel der Meßtechnik", Technisches Messen 6, S. 225-232 und Technisches Messen 7/8, S. 271-274.

GILLES, E und SCHULER, H. 1981, "Zur frühzeitigen Erkennung gefährlicher Reaktionszustände in chemischen Reaktoren", Chem. Ing.-Tech. 53 (1981) Nr.9, S.673-682.

HAHN, G.J., MORGAN C.B., LORENSEN W.E., 1983, "Color Face Plots for Displaying Product Performance": IEEE C.G. & A. 3, 23-29.

HERMAN, R. und MONTROLL, E.W., 1972, "A Manner of Characterizing the Development of Countries", Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. (69), 3019-3023.

HJORTSJö, C.H., 1969, "Man's Face and Mimic Language", Studentlitteratur, Lund, Schweden.

HUFF, D.C. und BLACK, W., 1978, "A Multivariate Graphic Display for Regional Analysis", in WANG, 1978, S. 199 - 218.

IZARD, C.E., 1971, "The Face of Emotion", New York: Appleton.

JUEN, G. und ZEITZ, M., 1983, "Beobachter im praktischen Einsatz", Fachberichte 'Mesen, Steuern, Regeln', Bd. 10: Fortschritte durch die digitale Meß- und Automatisierungstechnik. INTERKAMA-Kongress 1983. Herausgeber: M. SYRBE imd M. THOMA, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, S. 240 - 259.

KAHLERT, C., RÖSSLER, O.E. und VARMA, A., 1981, "Chaos in a Continuous Stirred Tank Reaktor with Two Consecutive First-Order Reactions, One Exo-, One Endothermic", in EBERT, K.H., DEUFLHARD, P. und JÄGER, W. (Herausgeber) "Modeling of Chemical Reaction Systems", Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, S. 355 - 365.

KALMAN, R.E., 1960, "A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems", Journal of Basic Engineering (ASME) Vol. 12 D, March 1960, S. 35 - 45.

KING, R., 1985, "Multiple Kalman Filters for Early Detection of Hazardous States": Proceedings of the international conference "On Industrial Process Modelling and Control", June 6-9, Hangzhou, China.

LUENBERGER, D. G., 1960, "Observers for Multivariable Systems", IEEE Trans. Automatic Control, AC-11 (1960, S. 190-197.

McDONALD, G.S. und AYERS, J.A., 1978, "Some Applications of the 'CHERNOFF FACES': A Technique for Graphically Representing Multivariate Data", in WANG, 1978, S. 183 - 197.

MEZZICH, J.E. und WORTHINTON, D.R.L., 1978: "A Comparison of Graphical Representations of Multidimensional Psychiatric Diagnostic Data". In: Wang, P.C.C (Herausgeber), 1978, S. 123 - 141.

MUSTERLE, W. und RÖSSLER, O.E., 1986: "COMPUTER-FACES: The Human Lorenz-Matrix". Bio Systems 19, S. 61 - 80, Elsevier.

PILOWSKY, I., THRONTON, M. und STOKES, B., 1985, "A Microcomputer Based Approach to the Quantification of Facial Expressions", Australian Physical and Engineering Sciences in Medicin, Vol. 8, No.2, p. 70-75.

PLUTCHIK, R. 1980, "A General Psychoevolutionary Teory of Emotion", In: Plutchik, R. und Kellermann, H., (Herausgeber): "Emotion: Theory Research, and Experience", Vol. 1., S. 3 - 33, New York, Academic Press.

RÖSSLER, O.E.,1976, "Chaotic Behavior in Simple Reaction Systems", Z. Naturforsch. 31a, S. 259 - 264.

SIEGEL, J., Goldwyn, R. und Friedman, H., 1971, Surgery, 70:232.

SPÄTH, H., 1973, "Spline-Algorithmen zur Konstruktion glatter Kurven und Flächen", Oldenbourg Verlag, München, Wien.

SCHULER, H., 1982, "Frühzeitige Erkennung gefährlicher Reaktionszustände in chemischen Reaktoren", Fortschr.-Ber. VDI-Z, Reihe 8, Nr. 52, VDI-Verlag, Düsseldorf.

THRONTON, M. und PILOWSKY, I., 1982, "Facial Expressions can be Modelled Mathematically", Brit. J. Psychiat., 140, 61-63.

WANG, P.C.C. (Herausgeber), 1978a, "Graphical Representation of Multivariate Data, Proceedings of the Symposium on Graphical Representation of Multivariate Data", Naval Postgraduate School, Monterey, California, Feb. 24, 1987, Academic Press, New York, San Francisco, London.

WANG, P.C.C. und LAKE, G.E., 1978 b, "Application of Graphical Multivariate Techniques in Policy Science", in WANG, 1978 a S. 13 - 58 .

WANG, P.C.C. (Herausgeber), 1979, "Information Linkage between Applied Mathematics and Industry", Academic Press, New York, San Francisco, London.

WICKE, E., 1974, "Instabile Reaktionszustände bei der heterogenen Katalyse", Chemie-Ingenieur-Technik, Zeitschrift für Verfahrenstechnik, Technische Chemie und Apparatewesen, Heft 9, S. 365 - 374.

WINTER, M. und BEISSER, H., 1985, "Picasso", Graphik-Handbuch Version 3.2, Dok.-Nr. 84/01 des Rechenzentrums der Universität Stuttgart.

YIN, R., 1970, "Face Recognition: A Special Process ?", Doktorarbeit, M.I.T.

ZEITZ, M., 1977, "Zur Lösung des Meßproblems bei chemischen Reaktoren mit Hilfe nichtlinearer Beobachter"; Proceedings of MECO'77, S. 153 - 158. Herausgeber: M. H. HAMZA; Acta Press, Anaheim , Calgary, Zürich.

Z. Anhang

Im folgenden Anhang werden die Datenfiles 'SFACE' für den unkritischen und für den kritischen Reaktionsverlauf explizit angegeben. Der Inhalt dieser Files stellt eine Auswahl von zwanzig Punkten des mimischen Ausdrucksraumes (vergl. Abb. 29 auf S. 65) von über vierhundert berechneten Punkten entlang der Reaktionstrajektorie dar (vergl. S. 73).

Desweiteren folgen Verzeichnisse der verwendeten Symbole, Abbildungen und Tabellen, sowie der Lebenslauf und eine Zusammenstellung der akademischen Lehrer.

Z.1 Simulationsprogramme

Das Reaktions-Simulationsprogramm und das Mimik-Simulationsprogramm sind in FORTRAN 5 programmiert. Die graphische Ausgabe wurde mittels Nonstandard-Externals des Plottpakets PICASSO des Universitäts-Rechenzentrums Stuttgart optimiert (vergl. Abschnitt 5, S. 97). Beide Programme können zusammen mit den nötigen Datenfiles als Listing, Lochkarten oder auf Band angefordert werden. Zur Erleichterung von Anpassungen existiert eine Liste der Externals mit einer kurzen Funktionsbeschreibung unter Angabe der Schnittstelle.

Anforderungen sind zu richten an: Wilfried A. Musterle
Institut für Theoretische Chemie
Universität Tübingen
Auf der Morgenstelle 8
D-7400 Tübingen 1

7.2 SFACE-Datei unkritische Reaktion:

SFACE: A = 15.0 B = 24.0 C = 34.0 N = 1 X10 = 0.0 X20 = 0.0

Nr.	Code	GNr.	Int.	GNr.	Int.	GNr.	Int.	GNr.	Int.
1	5	7	1.000	8	1.000	0	0.000	0	0.000
2	5	7	0.591	8	0.591	0	0.000	0	0.000
3	5	7	0.249	8	0.249	0	0.000	0	0.000
4	5	7	0.002	8	0.002	0	0.000	0	0.000
5	5	11	0.015	12	0.015	0	0.000	0	0.000
6	5	11	0.478	12	0.478	0	0.000	0	0.000
7	5	11	0.588	12	0.588	0	0.000	0	0.000
8	5	11	0.407	12	0.407	0	0.000	0	0.000
9	5	11	0.290	12	0.290	0	0.000	0	0.000
10	7	11	0.277	12	0.277	1	0.193	1	0.193
11	7	11	0.020	12	0.020	1	0.197	1	0.197
12	5	3	0.001	4	0.001	0	0.000	0	0.000
13	5	3	0.192	4	0.192	0	0.000	0	0.000
14	5	3	0.427	4	0.427	0	0.000	0	0.000
15	5	3	0.448	4	0.448	0	0.000	0	0.000
16	7	3	0.419	4	0.419	5	0.175	6	0.175
17	7	3	0.290	4	0.290	5	0.167	5	0.167
18	7	3	0.169	4	0.169	5	0.089	6	0.089
19	7	3	0.102	4	0.102	5	0.038	6	0.038
20	7	3	0.073	4	0.073	5	0.014	6	0.014

Legende: Nr. = Bildnummer; Code = Verarbeitungscode für das Mimik-Programm;
GNr. = Nummer des Gesichtes; Int. = Intensität des Ausdrucks.

7.3 SFACE-Datei kritische Reaktion:

SFACE: A = 14.0 B = 21.0 C = 34.0 N = 1 X10 = 0.0 X20 = 0.5

Nr.	Code	GNr.	Int.	GNr.	Int.	GNr.	Int.	GNr.	Int.
1	5	7	0.530	8	0.530	0	0.000	0	0.000
2	5	7	0.200	8	0.200	0	0.000	0	0.000
3	5	7	0.003	8	0.003	0	0.000	0	0.000
4	5	11	0.029	12	0.029	0	0.000	0	0.000
5	5	11	0.450	12	0.450	0	0.000	0	0.000
6	5	11	0.806	12	0.806	0	0.000	0	0.000
7	5	11	0.996	12	0.996	0	0.000	0	0.000
8	5	9	0.132	10	0.123	0	0.000	0	0.000
9	5	9	0.250	10	0.250	0	0.000	0	0.000
10	5	9	0.320	10	0.320	0	0.000	0	0.000
11	5	9	0.132	10	0.132	0	0.000	0	0.000
12	5	11	0.790	12	0.790	0	0.000	0	0.000
13	7	11	0.170	12	0.170	1	0.785	2	0.785
14	7	11	0.060	12	0.060	1	0.792	2	0.792
15	5	3	0.020	4	0.020	0	0.000	0	0.000
16	5	3	0.600	4	0.600	0	0.000	0	0.000
17	5	3	0.904	4	0.904	0	0.000	0	0.000
18	7	3	0.909	4	0.909	5	0.152	6	0.152
19	7	3	0.966	4	0.966	5	0.685	6	0.685
20	7	3	0.983	4	0.983	5	0.979	6	0.979

Legende: Nr. = Bildnummer; Code = Verarbeitungscode für das Mimik-Programm;
GNr. = Nummer des Gesichtes; Int. = Intensität des Ausdrucks.

7.4 Verzeichnis der verwendeten Symbole

a	Adiabatische Temperaturerhöhung
b	Kühlintensität
c	Arrhenius-Faktor
c_A	Konzentration des Eduktes (A)
c_{A0}	Ausgangskonzentration des Eduktes (A)
Cp	Wärmekapazität bei konstantem Druck
E	Aktivierungsenergie
Fk	Kühlfläche
(-delta H)	Reaktionsenthalpie (exotherm)
k0	Geschwindigkeitskonstante
Kr	Proportionalitätsfaktor der Temperatur-Regelung
kw	Wärmedurchgangszahl
n	Reaktionsordnung
Qr	Reaktionswärme
r	Reaktionsgeschwindigkeit
R	Allgemeine Gaskonstante
T	Reaktionstemperatur (Ist-Wert)
tau	Zeit
T0	Zulauftemperatur
THETA	Wärmedurchgang
Tk	Kühltemperatur
Tw	Temperatur-Sollwert
V	Volumen
X1	Reaktionsfortschritt (Maß für die Produktkonzentration (B))
X10	Anfangskonzentration des Produktes (B)
X2	Temperatur des Reaktors
X20	Einfülltemperatur

7.5 Verzeichnis der Abbildungen

Abb. 1: Vereinfachtes Schema eines Rührkessel-Reaktors
Abb. 2: Grenzsituationen des Reaktionsverlaufes: a = 0.
Abb. 3: Grenzsituationen des Reaktionsverlaufes: b = 0.
Abb. 4: Reaktor-Verhalten: Variation der adiabatischen Temperaturerhöhung
Abb. 5: Reaktor-Verhalten: Variation der Kühlung
Abb. 6: Reaktor-Verhalten: Variation der Zulauftemperatur
Abb. 7: Phasenebene mit der Ortskurve der Maximal-Temperatur
Abb. 8: Phasenebene mit dem Kritischen Gebiet
Abb. 9: Informationsfluß im menschlichen System
Abb. 10: Moderne Meßwarte in der Chemischen Industrie (BASF)
Abb. 11: Lineare Datenprofile (linearer Maßstab)
Abb. 12: Lineare Datenprofile (logarithmischer Maßstab)
Abb. 13: Zirkuläre Datenprofile (linearer Maßstab)
Abb. 14: Zirkuläre Datenprofile (logarithmischer Maßstab)
Abb. 15: ANDREW's Sinuskurven (lineare Fourier-Darstellung)
Abb. 16: Metroglyphen von DAVIS
Abb. 17: Original CHERNOFF-Gesicht
Abb. 18: Von DAVIS modifiziertes CHERNOFF-Gesicht
Abb. 19: CHERNOFF-Gesichter der ölgesellschaften
Abb. 20: Verschiedene multivariable Anzeigen bei psychologischen Versuchen
Abb. 21: Zustandsebene des Reaktors mit Bedeutungszuordnungen.
Abb. 22: Zustandsebene des Reaktors mit mimischer Bedeutungszuordnung.
Abb. 23: Intensitätsprofil des Trauer-Gebietes
Abb. 24: Intensitätsprofil des Furcht-Gebietes
Abb. 25: Intensitätsprofil des Wut - Gebietes
Abb. 26: Intensitätsprofil des Freude-Gebietes
Abb. 27: Intensitätsprofil des Lachen-Gebietes
Abb. 28: Intensitätsprofil des Überraschung-Gebietes
Abb. 29: Gesamtdarstellung aller Intensitätsprofile (außer Lachen)
Abb. 30: Trauer - Gesicht. Intensitäten: 0.25, 0.5, 0.75, 1.0
Abb. 31: Furcht - Gesicht. Intensitäten: 0.25, 0.5, 0.75, 1.0
Abb. 32: Wut - Gesicht. Intensitäten: 0.25, 0.5, 0.75, 1.0
Abb. 33: Freude - Gesicht. Intensitäten: 0.25, 0.5, 0.75, 1.0
Abb. 34: Lachen - Gesicht. Intensitäten: 0.25, 0.5, 0.75, 1.0
Abb. 35: Überraschung-Gesicht. Intensitäten: 0.25, 0.5, 0.75, 1.0
Abb. 36: Ekel - Gesicht. Intensitäten: 0.25, 0.5, 0.75, 1.0
Abb. 37: Typischer Verlauf einer Reaktion: (unkritisch)
Abb. 38: Mimik-Sequenz zur Darstellung des Reaktionsverlaufes aus Abb. 37.
Abb. 39: Typischer Verlauf einer Reaktion: (kritisch)
Abb. 40: Sequenz von Bildern zur Darstellung des Reaktionsverlaufes
Abb. 41: Gesichts-Areale
Abb. 42: Lage der Muskel-Vektoren
Abb. 43: Gummituch-Simulation
Abb. 44: Beispiel für asymmetrisches Mimik-Display mit Parameterangabe

7.6 Verzeichnis der Tabellen

Tab. 1: Bezeichnung einiger Ölgesellschaften

Tab. 2: Fünfzehn Parameter der Ölgesellschaften

Tab. 3: Beschreibung der Parameter aus Tab. 2

Tab. 4: Parameterzuordnung beim DAVIS-CHERNOFF-Gesicht mit Bereichsangaben

Tab. 5: Bedingungen zur Gebietsidentifikation

Tab. 6: Zuordnung der Mimik zu den Gebieten der Zustandsebene

Tab. 7: Hauptmenue des "MIMIK"-Programmes

8. Lebenslauf

Wilfried Anton Musterle

geboren am 20. Oktober 1955 in Tübingen als Sohn des Anton Musterle und seiner Ehefrau Karola Musterle, geb. Heubuch, verheiratet seit dem 17.5.85 mit Siglinde Gabriele Musterle, geb. Kriesch.

Juni 62 - 24. 3.66	Grundschule in Tübingen
19. 4.66 - 10. 7.71	Albert-Schweitzer-Realschule in Tübingen, Mittlere Reife.
20.10.71 - 29. 5.74	Kepler Gymnasium in Tübingen, Abitur.
10. 9.74	Immatrikulation an der Eberhard-Karls-Universität in Tübingen mit der Fächerkombination Chemie / Physik
14. 8.78 - 12. 2.79	Wissenschaftliche Arbeit bei Prof. Strähle. Thema: Bestimmung der Kristallstruktur von Wolframnitridtrichlorid-Phosphoroxidtrichlorid ($(WNCl_3 * POCl_3)_4$)
8. 5.79	Erstes Staatsexamen in Chemie
24. 4.80	Erstes Staatsexamen in Physik
10. 9.80 - 29. 1.82	Studienreferendar am Seminar Weingarten.
3. 2.82 - 1.12.86	Promotion bei Prof. Rössler mit vorliegender Arbeit
13. 8.82	Dienstantritt als Studienassessor am Max-Born Gymnasium in Backnang.
16. 4.86	Beförderung zum Studienrat und Verbeamtung

9. Akademische Lehrer

Meine akademischen Lehrer waren ...

Chemie: E. Bayer, J. Gelinek, B. Haas, M. Hanack, V. Hoffmann, H.R. Karfunkel, D. Krug, U. Kunze, E. Lindner, P.I. Lorenz, H. Meier, H. Oberhammer, G. Pausewang, O.E. Rössler, W. Rüdorff, K. Scheffler, F.F Seelig, J. Stadler, H.B. Stegmann, J. Strähle, H. Straub, H. Suhr, K.P. Zeller.

Physik: M. Baumann, F. Gönnenwein, P. Kramer, H. Krüger, G. Mack, G. Mertens, G. Möllenstedt, H. Pfister, A. Schwenk, F. Wahl, W.D. Hartmann.

Sonst: W. Jungermann (Psychologie),
H. Pommer (Mathematik),
R. Schief (Elektronik),
R. Staubert (Astronomie),
D. Wandschneider (Philosophie).

Sprint-Druck GmbH
7000 Stuttgart 30
Wiener Str. 117
Tel. 0711/81 26 69

Sprint-Druck GmbH
7000 Stuttgart 30
Wiener Str. 117
Tel. 0711/81 26 69